ORSAY
n° d'ordre :

UNIVERSITE DE PARIS-SUD

CENTRE D'ORSAY

THESE

présentée
pour obtenir

le Grade de Docteur ès-Sciences Physiques
par

Jacques TREINER

SUJET : Approche semi-classique de l'interaction nucléaire effective à partir des propriétés statiques (à température nulle et à température finie) et des résonances géantes électriques.

soutenue le 30 Juin 1981 devant la Commission d'examen

MM. M. JEAN — Président
G. HOLZWARTH — Rapporteur
J. AUDOUZE
O. BOHIGAS
B. JANCOVICI — Examinateurs
J. MARTORELL
N. MARTY

ORSAY
n°d'ordre :

UNIVERSITE DE PARIS-SUD

CENTRE D'ORSAY

THESE

présentée
pour obtenir

le Grade de Docteur ès-Sciences Physiques
par

Jacques TREINER

SUJET : Approche semi-classique de l'interaction nucléaire effective à partir des propriétés statiques (à température nulle et à température finie) et des résonances géantes électriques.

soutenue le 30 Juin 1981 devant la Commission d'examen

MM.	M. JEAN	Président
	G. HOLZWARTH	Rapporteur
	J. AUDOUZE	Examinateurs
	O. BOHIGAS	
	B. JANCOVICI	
	J. MARTORELL	
	N. MARTY	

Digitized by the Internet Archive
in 2026

https://archive.org/details/IA41547321_0010

TABLE DES MATIERES

PREMIERE PARTIE

INTRODUCTION

CHAPITRE I : CONSTRUCTION DE LA FONCTIONNELLE DE DENSITÉ D'ÉNERGIE

I.1 PARTIE POTENTIELLE - DME

I.2 PARTIE CINETIQUE

I.2.1 - La fonctionnelle ETF
I.2.2 - La fonctionnelle MTF

I.3 LIAISON AVEC LE MODELE ET LES COEFFICIENTS DE LA GOUTTELETTE LIQUIDE

I.4 LE DEVELOPPEMENT LEPTODERMIQUE

CHAPITRE II : LA SURFACE NUCLEAIRE

II.1 OU LE MILIEU EST SEMI-INFINI

II.1.1 - De la dissymétrie de la surface
II.1.2 - Epaisseur de surface, tension superficielle et énergie de surface
II.1.3 - Cas $N \neq Z$
II.1.4 - Une importante remarque

II.2 DU MILIEU SEMI-INFINI AUX NOYAUX FINIS

II.3 SUR LA DETERMINATION DU RAYON DE MATIERE NUCLEAIRE

CHAPITRE III : ASPECTS MACROSCOPIQUES DES DENSITÉS DE NIVEAUX NUCLÉAIRES

III.1 DONNEES EXPERIMENTALES

III.2 CALCULS MODELES

III.2.1 - Le puits infini ou : la boite de Hill-Wheeler
III.2.2 - L'oscillateur harmonique isotrope

III.3 ETUDE SEMI-CLASSIQUE SELF-CONSISTANTE. DEPENDANCE EN TEMPERATURE DES COEFFICIENTS DE LA GOUTTE LIQUIDE

CHAPITRE IV : RÉSONANCES GÉANTES ÉLECTRIQUES

IV.1 LA RESONANCE MONOPOLAIRE ISOSCALAIRE ET L'INCOMPRESSIBILITE NUCLEAIRE

IV.2 LES MODES ISOVECTORIELS ET L'ENERGIE DE SYMETRIE.

CONCLUSION

REFERENCES

DEUXIEME PARTIE : ARTICLES

[1] "A simple parametrization of the density matrix expansion and Skyrme-like forces"
(en collaboration avec H. Krivine)
J. of Phys. G., Nucl. Phys. 2 (1976) 285.

[2] "Extensions of the Thomas-Fermi approximation for finite nuclei"
(en collaboration avec O. Bohigas, X. Campi et H. Krivine)
Phys. Lett. 64 (1976) 381.

[3] "A simple approximation to the nuclear kinetic energy"
(en collaboration avec H. Krivine)
Phys. Lett. 88B (1976) 212.

[4] "Self-consistent description of nuclear level densities"
(en collaboration avec M. Barranco)
Nucl. Phys. A351 (1981) 269.

[5] "Derivation of a fluid dynamical Lagrangian and Electric Geant Resonances"
(en collaboration avec O. Bohigas et H. Krivine)
Nucl. Phys. A336 (1980) 155.

[6] "Nuclear incompressibility : from finite nuclei to nuclear matter"
(en collaboration avec O. Bohigas, H. Krivine et J. Martorell)
IPNO/TH 81-2 , à paraître dans Nuclear Physics.

[7] "An expansion of moments of powers of a Fermi distribution"
(en collaboration avec H. Krivine)
IPNO/TH 81-9, à paraître dans J. of Math. Phys.

Abréviations utilisées dans le texte

HF : Hartree-Fock
TDHF : Time-Dependent Hartree-Fock
RPA : Random Phase Approximation
DME : Density Matrix Expansion
EDF : Energy Density Formalism
TF : Thomas-Fermi
ETF : Extended Thomas-Fermi
ITF : Improved Thomas-Fermi (ETF limité au second ordre en $\hbar$)
MTF : Modified Thomas-Fermi

INTRODUCTION

L'approche microscopique et l'approche macroscopique constituent les deux pôles de la description de la structure nucléaire ; l'approche semi-classique utilisée dans cette thèse est comme un pont par lequel la communication entre les deux premières est rendue plus aisée.

Si l'on néglige les degrés de liberté mésoniques, l'interaction entre protons et neutrons dans le noyau est représentée par un potentiel effectif -i.e. le potentiel nucléon-nucléon "modifié" par la présence des autres nucléons. La méthode de Hartree-Fock et son extension dépendant du temps TDHF fournissent alors le meilleur point de départ pour la description microscopique d'un système de fermions dont la dimension est de de l'ordre du libre parcours moyen des constituants -i.e. un système de particules indépendantes, libres de se déplacer dans un champ moyen.

L'interaction effective entre nucléons dans le noyau constitue l'ingrédient de base de l'approche microscopique. A l'approximation de densité locale [BGW-58], fondée sur la propriété de saturation des forces nucléaires par répulsion à courte portée, où l'on remplace l'interaction entre 2 nucléons dans le noyau par son équivalent dans la matière nucléaire à la même densité, l'interaction effective peut être construite à partir du potentiel nucléon-nucléon libre -qui contient l'information sur le problème à 2 corps. Pratiquement, la resommation de la série de Brueckner-Goldstone est limitée -dû à la grande complexité des calculs- et un réajustement des résultats de matière nucléaire est nécessaire afin d'obtenir une énergie et un moment de saturation convenables ; on fait ainsi appel à des résultats du modèle macroscopique, qui contient des informations moyennes sur le problème à N corps. L'interaction effective ainsi déterminée est ensuite utilisée dans des calculs HF de noyaux finis [Ne 70, Ca 72].

Dans le même temps, une approche plus phénoménologique de l'interaction effective, à partir de forces de portée nulle [Sk-56, BWi-56, Wi-56] a donné naissance à la génération des forces de type Skyrme [V-69, VB-70, VB-72, BFNQ-75]

où l'énergie apparaît comme une fonctionnelle de la densité de matière, de ses dérivées et de la densité d'énergie cinétique. Le développement de la Matrice Densité de Negele et Vautherin (DME) [N V -72,N V -75] a permis d'opérer un lien entre l'interaction effective obtenue à partir d'une interaction réaliste et la forme de type Skyrme. Néanmoins la DME ne permet pas une détermination pratique des paramètres optimum de la fonctionnelle à partir de l'interaction réaliste et la construction des interactions de Skyrme a été faite par comparaison de résultats de calculs HF avec les propriétés statiques des noyaux [BFNQ-75]. Un nombre considérable de propriétés statiques et dynamiques a pu être ainsi atteint dans un cadre théorique commun. Cependant il est à noter que certaines faiblesses des résultats obtenus avec les interactions de Skyrme existantes (concernant par exemple le calcul de barrières de fission ou de résonances géantes) ne tiennent pas à une insuffisance de la méthode du champ moyen mais à une mauvaise description de *grandeurs macroscopiques*, telles que l'incompressibilité nucléaire (comme déjà indiqué dans la référence [F1-75]) ou l'énergie de symétrie de surface : la fonctionnelle de Skyrme est en effet sous-déterminée par les propriétés statiques des noyaux.

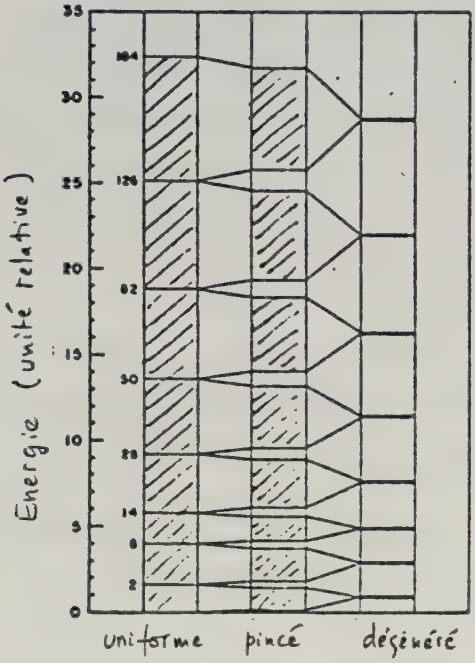
L'approche macroscopique - le Modèle de la Goutte Liquide- proposée par Weizsäcker en 1935, caractérise l'énergie du noyau par quelques grandeurs physiques de type classique (énergie de volume, de surface, d'asymétrie, de Coulomb) et décrit ainsi le comportement moyen des masses nucléaires ; il décrit également la vallée de stabilité. Dans la version plus détaillée de Myers et Swiatecki [MySw-69], d'autres degrés de liberté sont introduits (compressibilité nucléaire, diffusivité des distributions neutron et proton, creusement de la densité de protons dû à la répulsion coulombienne, déformation). Myers et Swiatecki proposent également une procédure simple pour calculer les corrections de couche à l'énergie de Goutte Liquide.* Remarquant que ces corrections sont plus grandes au voisinage des noyaux sphériques -à cause des dégénérescences plus fortes de cette configuration- ces auteurs introduisent dans la formule de masse un terme qui tient compte *à la fois* des corrections de couche et de la déformation, de la forme :

---

*Notons que ces corrections de couche sont de l'ordre d'une dizaine de MeV pour une énergie de liaison de l'ordre du millier de MeV.

$$S(N,Z)\, e^{-\left(\frac{\delta r}{a}\right)^2}$$

où $(\delta r)^2$ représente la déformation quadratique moyenne du noyau (N,Z) et a un paramètre ajustable. Le terme S(N,Z) est calculé à partir d'un spectre de gaz de Fermi ; le spectre est "pincé" (bunched) de façon à reproduire les nombres magiques (cf. schéma ci-contre) et S(N,Z) est obtenu par différence entre l'énergie du fondamental calculée avec le spectre "non pincé" et celle calculée avec le spectre "pincé".



C'est cependant à Strutinsky [S-68] que l'on doit une méthode pour calculer, à partir d'un spectre réaliste à une particule (ε_i), la partie goutte liquide et la partie correction de couche de l'énergie du fondamental E ; on écrit

$$E = E_{GL} + \delta E$$

et la partie goutte liquide E_{GL} est obtenue en remplacant la densité de niveaux à une particule

$$g(\varepsilon) = \sum_i \delta(\varepsilon - \varepsilon_i)$$

par une fonction convenablement lissée $\tilde{g}(\varepsilon)$. On a alors

$$E_{GL} = 2 \int^{\varepsilon_F} \varepsilon\, \tilde{g}(\varepsilon)\, d\varepsilon$$

où ε_F est déterminé par la conditon de normalisation :

$$A = 2 \int^{\varepsilon_F} \tilde{g}(\varepsilon)\, d\varepsilon$$

(le facteur 2 tient compte de la dégénérescence en spin.)
La correction de couche δE s'obtient par différence :

$$\delta E = \sum^{\varepsilon_F} \varepsilon_i - E_{GL}$$

Dans les expressions ci-dessus, ε_F désigne l'énergie de Fermi.

Une formulation self-consistante de la méthode de Strutinsky a été développée par Brack et Quentin [BQ-75], qui présentent dans la référence [BQ-80] une revue de la question.

Au début des années 70, plusieurs auteurs [BR-71, Je-76, J BB -75] discutent les relations entre la méthode de Strutinski et *l'approximation semi-classique*, dans l'idée d'atteindre, au moyen de cette dernière, les propriétés de goutte liquide. Dans cette approche en effet, on conserve -traces quantiques- la statistique à laquelle obéissent les nucléons et l'on fait l'approximation d'un remplissage maximum de l'espace de phase compatible avec le principe d'incertitude de Heisenberg ; les effets de couche sont supprimés et les différentes grandeurs évoluent régulièrement en fonction du nombre de masse A. En fait, l'approximation de TF, appliquée avec succès aux systèmes atomiques, a très tôt été utilisée dans le contexte nucléaire pour obtenir quelque information sur l'interaction nucléon-nucléon [He-33, Ma-33] -situation en quelque sorte symétrique du cas atomique où l'interaction est bien connue. (Dans ces premiers travaux, le mécanisme de saturation et le rapport Z/N des noyaux constituent les contraintes expérimentales -de type macroscopique- dont on cherche les conséquences sur le signe et la portée de l'interaction.). Avec l'introduction d'interactions effectives de portée nulle, l'utilisation d'une approximation semi-classique pour la partie cinétique permet une *résolution self-consistante approchée* des équations de Hartree-Fock. On obtient ainsi les distributions de matière et l'énergie du système. Swiatecki [Sw 51], Skyrme et Wilets discutent les propriétés de surface du milieu semi-infini (tension superficielle, épaisseur de surface, peau de neutrons). Les grandeurs macroscopiques du Modèle de la Gouttelette peuvent ainsi être calculées et Myers et Swiatecki déterminent par cette méthode certains paramètres de leur modèle [MySw-69 qui ne peuvent être déterminés avec suffisamment de fiabilité par ajustement sur les masses expérimentales. Ils utilisent pour cela une force de Seyler-Blanchard où la saturation est obtenue par un terme dépendant de l'impulsion relative des 2 nucléons. Brueckner et al.[BBJL-68] puis Bethe [Be-68] déterminent la partie potentielle de la fonctionnelle de la densité par ajustement sur des calculs de matière nucléaire et déterminent un terme d'inhomogénéité par comparaison avec quelques noyaux finis. Lombard [Lo-73]

utilise une méthode analogue. Néanmoins dans tous ces calculs la partie externe de la surface -au-delà du point tournant- est mal décrite, puisque dans cette région l'approximation TF cesse d'être valable.

Plus récemment, les développements semi-classiques en puissance de $\hbar$ à partir de la fonction de partition d'un système de fermions dans un potentiel [Je-76] ou à partir du formalisme utilisant la transformation de Wigner [GV-79] permettent de retrouver et d'étendre un résultat de Kirzshnits [Ki-67], obtenu par une méthode de théorie des champs, concernant les corrections d'inhomogénéité à l'approximation de Thomas-Fermi. Cette fonctionnelle de Thomas-Fermi "étendue" (ETF) assure un comportement asymptotique correct des densités. Bien que la partie externe de la surface soit encore mal décrite, les quantités intégrées reproduisent les valeurs HF lissées "à la Strutinsky", de façon très précise, dans le cas sphérique [CJB77, BCKT-76] comme dans le cas déformé [GHB-80]. Les effets de couche peuvent alors être obtenus *en résolvant le système d'équations de Schrödinger avec pour potentiel le champ de HF self-consistant semi-classique* (traitement perturbatif des effets de couche) (cf. Réf.[2]).

Dans la mesure où les méthodes semi-classiques permettent d'obtenir souvent des expressions analytiques simples, outre leur intérêt propre comme méthode d'analyse dans des situations où les effets de couche sont peu importants, l'approximation ETF utilisée avec des forces effectives de portée nulle permet de construire un formalisme de densité d'énergie où le lien entre grandeurs macroscopiques et paramètres de l'interaction effective peut être fait de façon quantitative.

Il est à noter d'ailleurs que leur nombre est à peu près le même, si bien que la construction d'interactions effectives incorporant le maximum d'informations expérimentales s'en trouve considérablement simplifiée. En effet, au lieu de discuter les valeurs de paramètres qui n'ont pas d'interprétation physique simple et directe -ceux de l'interaction effective- on peut discuter en terme de grandeurs physiques observables et "remonter", au moyen des expressions fournies par l'approche semi-classique, à l'interaction. L'ajustement final nécessite cependant des calculs microscopiques, dans la mesure où les grandeurs macroscopiques

ne sont pas toutes connues avec une précision suffisante. Elles délimitent cependant un espace de variation des paramètres de l'interaction effective dont il n'a pas toujours été fait un usage maximum. Ce programme est en partie contenu dans cette thèse et en constituerait un prolongement naturel.

Les articles servant de noyau à la présente thèse traitent de trois types de propriétés des noyaux : propriétés statiques à température nulle [réfs. 1,2,3], propriétés moyennes d'excitation réf.[4] et résonances géantes [réfs.5,6]. On donne dans la réf.[7] la technique utilisée pour obtenir le développement leptodermique des propriétés nucléaires moyennes, d'où les développements en $A^{-1/3}$ peuvent être déduits. Dans les chapitres qui suivent on présente une mise à jour -voire une mise au point- de certains aspects de ces travaux ainsi que plusieurs développements originaux.

Le chapitre I est consacré à la construction de la densité d'énergie comme fonctionnelle des densités de matière (et de leurs dérivées). En ce qui concerne la partie potentielle, on étudie la validité de la DME pour deux interactions effectives de portée finie et l'on construit, dans un des cas, une interaction de Skyrme "équivalente". La deuxième partie de ce chapitre traite des fonctionnelles semi-classiques pour la densité d'énergie cinétique et discute notamment l'effet des termes d'inhomogénéité corrigeant l'approximation de TF sur le profil des densités de matière.

Dans la mesure où l'ensemble des situations traitées dans cette thèse sont proches de l'équilibre, il a paru utile d'en faire une étude détaillée, et particulièrement des propriétés de la surface nucléaire. Ceci est l'objet du chapitre II, où l'on présente une étude du milieu semi-infini. Cette étude a son point de départ dans un travail non publié de J. Coté. L'utilisation du développement leptodermique permet d'obtenir des expressions analytiques des principales propriétés de la surface nucléaire puis de remonter au cas des noyaux finis. L'accent est mis i) sur l'analyse de la dissymétrie interne-externe de la surface nucléaire et ii) sur le calcul de l'énergie de symétrie de surface.

Certains développements de la réf [4] concernant la chaleur spécifique nucléaire sont présentés dans le chapitre III. Dans une description microscopique, la densité de niveaux excités dépend essentiellement de la densité de niveaux individuels près de la surface de Fermi. Dans une description semi-classique, ces niveaux sont ceux des nucléons les plus externes, i.e. ceux de la surface. On montre en particulier que certaines propriétés fines du "paramètre de densité de niveaux", pour lequel d'importants progrès ont été récemment accomplis concernant la distinction des aspects microscopique-macroscopique [KRK-78], peuvent être bien comprises en terme de structure de la surface nucléaire, et notamment de la variation de la diffusivité des densités de neutrons et protons. La détermination de la dépendance en température des coefficients de la goutte liquide constitue un autre prolongement de la réf. [4]. Une telle "formule de masse chaude" peut être utile en physique des ions lourds et en astrophysique.

Enfin dans le chapitre IV, consacré aux résonances géantes, on effectue certains développement de la référence [5] concernant les modes isovectoriels (monopole et dipole). Le rôle de la surface, en partie analysé dans la réf [5] puis récemment par Lipparini et Stringari [LS-81], est étudié plus en détail -i.e. en relation avec les propriétés de symétrie de volume et de surface de l'interaction.

L'ensemble de la discussion montre que l'approximation semi-classique permet un contrôle suffisant de l'interaction effective schématique. La self-consistance de la méthode assure la cohérence des différents résultats obtenus concernant les propriétés statiques (à température nulle et non nulle) et les résonances géantes. On a pu ainsi construire, à titre d'exemple (cf. réf. [5]), une interaction effective incorporant une plus grande information expérimentale (concernant notamment l'incompressibilité et les propriétés de symétrie) et utilisée par d'autres auteurs dans des calculs microscopiques. Ces calculs montrent que certains désaccords avec les résultats expérimentaux, concernant par exemple les barrières de fission, ne tenaient pas à l'approximation du champ moyen mais aux interactions utilisées.

On trouvera en conclusion un résumé des principaux résultats obtenus, ainsi que la mention de quelques problèmes ouverts, accessibles à l'approche semi-classique, qui devraient être abordés prochainement.

CHAPITRE I

CONSTRUCTION DE LA FONCTIONNELLE DE DENSITÉ D'ÉNERGIE

Deux étapes distinctes sont nécessaires pour construire la fonctionnelle de densité d'énergie $\mathcal{H}(\rho_n, \rho_p, \rho'_n, \rho'_p \ldots \tau_n, \tau_p)$, car les techniques utilisées pour la partie cinétique et la partie potentielle sont de nature différente : pour la partie cinétique, il s'agit, comme on l'a dit, de développements semi-classiques en puissances de $\hbar$ (à partir de la fonction de partition [Je-76] ou à partir de la transformée de Wigner de la densité à un corps [GV-79]) ; pour la partie potentielle, l'utilisation de forces de portée nulle de type Skyrme ([Sk-56, V-69, VB-70, VB-72, BFNQ-75]) conduit à exprimer la partie potentielle de l'hamiltonien comme fonctionnelle des densités de matières, de leurs dérivées et des densités d'énergie cinétique (dans le cas d'une masse effective différente de la masse nue). La relation entre cette approche et celle utilisant, à l'approximation de densité locale, des interactions effectives de portée finie résultant de calculs de matrice G dans la matière nucléaire, est analysée dans les travaux de Negele et Vautherin ([N V -72, N V -75]) ainsi que dans celui de Campi et Bouyssy [C B -78]) concernant le Développement de la Matrice Densité (DME).

Nous rappellerons maintenant les principaux résultats concernant l'étude de la validité de la DME (réf.[1] et [SVCC-75]). Dans une seconde partie nous traiterons de la partie cinétique.

I.1 Partie potentielle - DME

L'idée centrale de la DME est d'effectuer un développement au second ordre de la densité à un corps non diagonale tel que le premier ordre corresponde à l'expression dans la matière nucléaire

(approximation de Slater). Notons qu'il ne s'agit donc pas d'un développement de courte portée de l'interaction effective.

La DME est obtenue par développement en puissances de la non localité de la moyenne angulaire de la matrice densité d'un système saturé en spin :

$$\frac{1}{4\pi}\int d\Omega_s\, \rho(\vec{r}+\frac{\vec{s}}{2},\vec{r}-\frac{\vec{s}}{2}) = \frac{1}{4\pi}\int d\Omega_s \sum_M \Psi_M^*(\vec{r}+\frac{\vec{s}}{2})\Psi_M(\vec{r}-\frac{\vec{s}}{2})$$

$$= 3\frac{j_1(k_F s)}{k_F s}\rho(\vec{r}) + \frac{35}{2}\frac{s^2 j_3(k_F s)}{(k_F s)^3}\left[\frac{1}{4}\Delta\rho(r) - \tau(r) + \frac{3}{5}k_F^2\rho(r)\right] + \cdots \qquad \text{(I-1)}$$

Cette expression, dont on ne conserve que les 2 premiers termes, est introduite dans l'expression HF de l'énergie totale du système et permet de définir une densité d'énergie :

$$E = \int \mathcal{H}\, d\vec{r}$$

avec

$$\mathcal{H}(\rho_n \rho_p \rho'_n \rho'_p \cdots \tau_n \tau_p) = H(\rho_n \rho_p) + \sum_{i=n,p}\left\{\frac{\hbar^2}{2m^*_i(r)}\left(\tau_i(r) - \frac{3}{5}\rho_i(r)k_{F_i}^2(r)\right) + C_i(r)|\vec{\nabla}\rho_i(r)|^2\right\} + D(\vec{r})\vec{\nabla}\rho_n(\vec{r})\vec{\nabla}\rho_p(\vec{r})$$

où $\rho(\vec{r}) = \rho(\vec{r},\vec{r})$ et τ_n et τ_p représentent les densités d'énergie cinétique. Les fonctions $\frac{\hbar^2}{2m^*_i(r)}$, $C_i(r)$ et $D(r)$ s'expriment à l'aide d'intégrale faisant intervenir le potentiel initial.

Dans l'équation (I- 1) le second membre ne dépend évidemment pas de k_F *si on considère tous les termes du développement.* Cependant la troncature au second ordre introduit une dépendance spurieuse en k_F. Il y a donc là un degré de liberté dans la prescription utilisée pour $k_F(R)$. Dans les articles originaux, Negele et Vautherin choisissent la prescription la plus simple $k_F(r) = \left[\frac{3\pi^2}{2}\rho(r)\right]^{1/3}$. Plus récemment, Campi et Bouyssy remarquent qu'une meilleure approximation est obtenue si

l'on choisit $k_F(r)$ de façon à annuler le second terme du développement (I-1) Ils montrent que ce choix revient à reproduire exactement le moment d'ordre 0 et le moment d'ordre 2 de la transformée de Wigner de la densité mixte. La figure suivante, extraite de la réf. [C B -78], montre la comparaison des diverses approximations avec le résultat exact. Il est vraisemblable, au vu des courbes ci-dessus, que la DME de Campi-Bouyssy permettrait de construire une fonctionnelle des densités de matière et d'énergie cinétique reproduisant mieux que celle de Negele-Vautherin les résultats HF de l'interaction initiale. Une telle étude n'a cependant pas été faite.

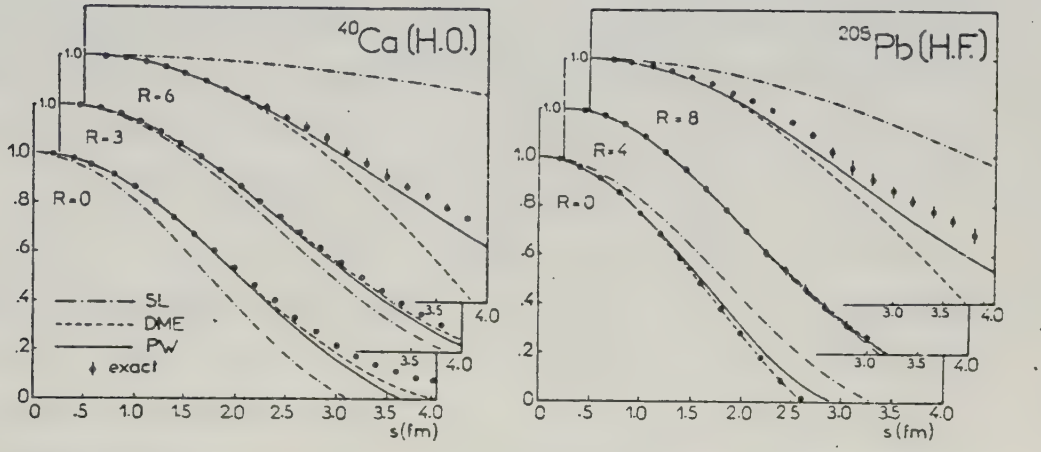


Fig. 1. Ratio of off-diagonal to diagonal density matrix $\rho(R+s/2, R-s/2)/\rho(R)$ as a function of the interparticle distance s for various values of the distance from the centre of the nucleus R (in fm). The lower/upper ends of the "error bars" are the exact values calculated for s parallel/perpendicular to R.

SL : Approximation de Slater PW : DME de Campi-Bouyssy.
DME : DME de Negele-Vautherin

Les principaux résultats concernant la DME de Negele-Vautherin peuvent se résumer comme suit :

i) La DME tend à donner, comparativement aux calculs HF utilisant l'interaction initiale, des rayons carrés moyens trop petits (2 à 8 %) et des énergies de liaison trop grandes (10 à 20 %), la qualité de l'accord dépendant du rapport de l'énergie d'échange à l'énergie directe de l'interaction : la DME est en effet meilleure pour le terme d'échange que pour le terme direct. D'autre part la densité du spectre à une particule est trop faible (comparée au spectre exact), ce qui suggère que la masse

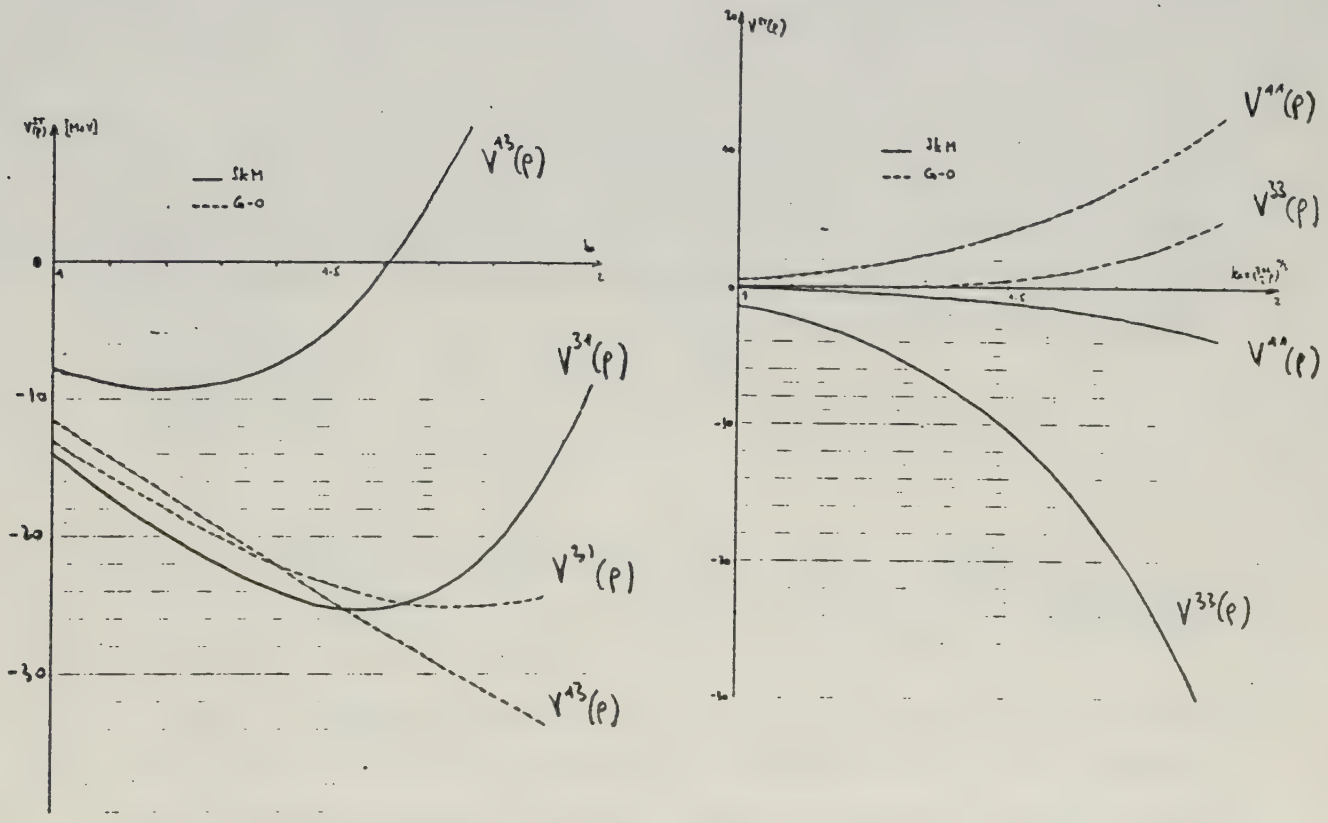
effective calculée par la DME est trop petite. (La DME de Campi-Bouyssy devrait améliorer l'accord)

ii) la méthode fournit cependant une justification à l'utilisation d'interactions effectives de portée nulle dont on ajuste les paramètres sur les propriétés des noyaux. On a pu par exemple, dans le cas de l'interaction G-O de Campi-Sprung [C Sp-72], construire une interaction de type Skyrme équivalente à la DME (à $\sim$ 1 % sur les propriétés statiques essentielles : énergies par particules, rayons, spectre à une particule, densités), au prix d'une certaine modification de leur forme initiale [VB-72]. La paramétrisation originale des forces de Skyrme, où la dépendance en densité provenait d'une force de contact répulsive à 3 corps assurant la saturation, conduisait nécessairement à des valeurs de l'incompressibilité nucléaire K très élevées : K > 300 MeV. L'interaction G-O donne une valeur K = 182 MeV. Il fallut donc changer la dépendance en densité de l'interaction de Skyrme et nous choisîmes une forme $\rho^{1/6}$ (au lieu de ρ) car c'était la même que celle de l'interaction G-O. (Notons que d'autres auteurs avaient, dans le même but, considéré des dépendances en $\rho^{1/3}$ [Kö-71]). Les mesures récentes concernant la résonance monopolaire isoscalaire (le mode "respiratoire") conduisent à des valeurs de K de l'ordre de 220 MeV et confirment en conséquence une dépendance en densité relativement faible (cf. Chapitre IV).

La DME de Negele et Vautherin ne permet cependant pas un calcul suffisamment précis des paramètres de la force de Skyrme. Peut-être est-ce d'ailleurs trop lui demander et suffit-il de mieux comprendre le fondement du formalisme de densité d'énergie et des forces de Skyrme. C'est par une dialectique entre propriétés microscopiques et macroscopiques qu'une détermination précise des paramètres de l'interaction effective peut en fait être obtenue.

Nous terminerons la comparaison entre l'interaction G-O et les interactions de type Skyrme par un bref examen des propriétés de spin.

La figure suivante montre les contributions à la courbe de saturation de chaque sous-espace, pour l'interaction G-O[1] et SkM. On voit que la saturation est obtenue dans les deux cas par des mécanismes très différents (cf.[Ca-72]). La principale différence réside dans les courbes des potentiels relatifs aux états impairs, faiblement répulsifs dans le cas de G-O et fortement attractifs dans le cas des forces de type Skyrme. Il est facile de voir que ceci ne tient pas à un choix malencontreux des paramètres de la force (les courbes obtenues pour S-III sont tout à fait analogues à celles de SkM) mais à la *forme* de la paramétrisation de Skyrme.



(1) Les courbes obtenues avec le potentiel de Paris sont similaires à celles de G-O.

En effet, si l'on désigne par $V^{ST}(\rho)$ l'expression du potentiel dans l'état de spin S et d'isospin T, on a, dans le cas des forces de Skyrme, pour les états impairs :

$$V^{11}(\rho) = \frac{3}{160} t_2 (1-x_2) \left(\frac{3\pi^2}{2}\right)^{2/3} \rho^{5/3}$$

$$V^{33}(\rho) = 9 \frac{3}{160} t_2 (1+x_2) \left(\frac{3\pi^2}{2}\right)^{2/3} \rho^{5/3}$$

Pour obtenir des contributions semblables à celles de G-O (i.e. répulsives), il faut nécessairement :

$$t_2 > 0$$

$$|x_2| < 1$$

On peut montrer que ces conditions sont incompatibles avec l'obtention d'une énergie de surface et d'une masse effective satisfaisantes. En effet, l'étude du chapitre II permet d'avoir une estimation grossière du coefficient d des termes en gradients de la fonctionnelle de Skyrme, qui s'écrit, dans le cas symétrique $\rho_n = \rho_p$:

$$d = \frac{1}{64} [9t_1 - t_2(5+4x_2)] + \frac{\beta-\gamma}{16} [3t_1 + t_2(5+4x_2)]$$

La tension superficielle Σ s'écrit (cf. éq.43) (à l'approximation où l'on représente la densité de matière par une distribution de Fermi) :

$$\Sigma = 2 \frac{\rho_{um}}{t} \left[\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\beta}{2} + d \frac{\rho_{um}}{6} + V_{10} \frac{\rho_{um}^2}{12} \right]$$

Nous verrons au chapitre II que des valeurs raisonnables des différentes grandeurs sont :

$$\Sigma \simeq 1 \text{ MeV fm}^{-2}$$

$$t \simeq 0.6 \text{ fm}$$

D'où, en choisissant $\rho_{nm} = 0.16$ fm^{-3} et $V_{S_0} = -150$ MeV$\times$fm^6

$$d \simeq 50 \text{ MeV fm}^3$$

Par ailleurs, la masse effective s'écrit :

$$\frac{\hbar^2}{2m^*} = \frac{\hbar^2}{2m} + \frac{1}{16}\left[3t_1 + t_2(5+4x_2)\right]\rho_{nm}$$

soit

$$\frac{1}{16}\left[3t_1 + t_2(5+4x_2)\right] = \frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{\rho_{nm}}\left(\frac{m}{m^*} - 1\right) \simeq 30 \text{ MeV fm}^5, \text{ pour } \frac{m^*}{m} \simeq 0.8$$

On a donc les 2 relations (avec $\beta = \frac{1}{36}$ et $\gamma = \frac{1}{3}$) :

$$9t_1 - t_2(5+4x_2) \simeq 3700 \text{ MeV.fm}^5$$

$$3t_1 + t_2(5+4x_2) \simeq 480 \text{ MeV.fm}^5$$

d'où l'on tire : $t_1 \simeq 350$ mais surtout

$$t_2(5+4x_2) \simeq -560 \text{ MeV.fm}^5$$

incompatible avec les conditions ci-dessus :

$$t_2 > 0 \ , \ |x_2| < 1$$

Par conséquent si l'on croit aux courbes de matière nucléaire par sous-espace (S,T) de l'interaction G-O, il faut nécessairement conclure à la défaillance, sur ce point, de la paramétrisation de Skyrme.

Il semble, d'après la présente discussion, que la seule façon de remédier à ce défaut consiste à introduire une dépendance en densité (notamment) dans le terme en t_2 de l'interaction : du reste une telle conclusion semble déjà se dégager de la réf.[NV-72] , où il apparaît nettement que les coefficients t_1 et t_2 déduits de la DME présentent sans conteste une dépendance en densité non négligeable.

I.2.1 - La fonctionnelle ETF

Le développement en $\hbar$ de la fonction de partition d'un système de fermions dans un champ moyen conduit à la fonctionnelle ETF pour l'énergie cinétique. Rappelons que, à l'ordre 0 en $\hbar$, on obtient l'approximation de TF. A l'ordre $\hbar^2$, on obtient des termes correctifs d'inhomogénéité faisant intervenir des dérivées d'ordre 2 des densités. A l'ordre $\hbar^4$, on obtient des termes correctifs où apparaissent des dérivées du 4ème ordre etc.. Cette fonctionnelle contient des termes correctifs provenant de la masse effective (s'il existe un potentiel dépendant des vitesses) et de l'interaction spin-orbite (cf. réf.[Je 76] et réf.[CJB 77]). La fonctionnelle de la densité d'énergie cinétique s'écrit (à l'ordre 2 en $\hbar$)

$$\tau_q = \alpha \rho_q^{5/3} + \beta \frac{(\nabla \rho_q)^2}{\rho_q} + \gamma \Delta \rho_q + \frac{1}{6} \frac{\vec{\nabla} f_q \nabla \rho_q}{f_q} - \frac{1}{12} \rho_q \frac{(\nabla f_q)^2}{f_q} + \frac{1}{6} \rho_q \frac{\Delta f_q}{f_q} + \frac{1}{2} \left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^2 \rho_q \frac{\vec{s}_q^2}{f_q} \qquad \text{(I-2)}$$

où

$$\alpha = \frac{3}{5}(3\pi^2)^{4/3} \qquad \beta = \frac{1}{36} \qquad \gamma = \frac{1}{3}$$

$$f_q = \left(\frac{m}{m^*}\right)_q$$

$$\vec{s}_q = \frac{3}{4} W_0 \vec{\nabla} \rho_q \qquad q = n, p$$

et où W_0 représente l'intensité de l'interaction spin-orbite.
L'expression semi-classique de la densité d'énergie spin-orbite a la même forme que la correction à l'énergie cinétique. Elle s'écrit en effet :

$$W_{so}(\vec{r}) = -\frac{3}{4} W_0 \rho_q \vec{\nabla} \vec{J}_q \qquad \text{(I-3)}$$

où

$$\vec{J}_q(\vec{r}) = -\frac{2m}{\hbar^2} \rho_q \frac{\vec{s}_q}{f_q} \qquad \text{(I-4)}$$

soit

$$W_{so}(r) = \frac{3}{4} W_0 \frac{2m}{\hbar^2} \rho_q \vec{\nabla} \cdot \left(\rho_q \frac{\vec{s}_q}{f_q}\right) \qquad \text{(I-5)}$$

Comme cette expression apparaît sous un signe intégral dans le calcul de l'énergie totale, on peut aussi bien prendre

$$W_{so}(r) = -\frac{9}{16}(W_o)^2 \frac{2m}{\hbar^2} \frac{\rho_q}{\tau_q}(\nabla\rho_q)^2 \qquad (I\text{-}6)$$

Dans (I-2) la partie provenant du terme spin-orbite s'écrit (après multiplication par $\frac{\hbar^2}{2m^*_q}$)

$$\frac{1}{2}\cdot\frac{9}{16}(W_o)^2 \frac{2m}{\hbar^2} \frac{\rho_q}{\tau_q}(\nabla\rho_q)^2 \qquad (I\text{-}7)$$

En regroupant (I-6) et (I-7), on voit que la contribution de l'interaction spin-orbite s'écrit, au total (cinétique + potentiel) :

$$W_{so}(r) = V_{so}\frac{\rho_q}{\tau_q}(\nabla\rho_q)^2 \quad , \quad V_{so} = -\frac{9}{32}(W_o)^2\frac{2m}{\hbar^2} \qquad (I\text{-}8)$$

Concernant les propriétés de la fonctionnelle ETF, il convient de noter les points suivants :

i) A l'ordre 0 en $\hbar$, c'est-à-dire à l'approximation de TF les solutions de l'équation d'Euler avec une fonctionnelle de Skyrme pour la partie potentielle s'annulent en un point de l'espace comme $(r-r_o)^2$ [Sk 56]. Pour obtenir des solutions raisonnables, on impose donc $\rho(r) = 0$ pour $r > r_o$. Lombard [Lo - 73] , remarquant que l'approximation semi-classique cesse d'être valide au-delà du point tournant, ne considère la solution TF que jusqu'à une densité de l'ordre de 15 % de sa valeur au centre et ajuste au-delà une distribution de Fermi.

ii) A l'ordre 2 en $\hbar$, i.e. en considérant (I-2), bien que l'utilisation du développement semi-classique ne soit pas justifiée au-delà du point tournant, il se trouve que le terme de type Weizäcker en $\beta\frac{(\nabla\rho_q)^2}{\rho_q}$ assure un comportement asymptotique acceptable [Lo - 73] et réf.[1]

$$\rho_q(r) \sim \exp -\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}\frac{\lambda_q}{\beta}} \qquad (I\text{-}9)$$

où λ_q représente l'énergie de séparation.

Néanmoins la valeur semi-classique $\beta = \frac{1}{36}$ conduit à une description trop abrupte de la surface nucléaire.

iii) A l'ordre 4 en $\hbar$, il semble [GHB80] que l'on corrige ce défaut, mais le comportement asymptotique des solutions est maintenant en $1/r^6$. Un calcul self-consistant utilisant la fonctionnelle avec les termes du 4è-ordre n'a jamais été fait ; Brack et al. font en effet des calculs variationnels restreints en imposant une forme de Fermi aux densités, évitant ainsi le comportement peu physique en $1/r^6$.

Tous les calculs présentés dans le présent travail utilisent la forme (I-2) pour $\tau(\rho)$, i.e. le développement à l'ordre 2 en $\hbar$.

iv) Aucune hypothèse n'est faite, dans la dérivation du développement semi-classique, sur les symétries du système (i.e. du champ moyen). Autrement dit l'approximation doit être utilisable -et est utilisée- pour des systèmes sphériques comme pour des systèmes déformés [GHB-80]. Ce point, qui a fait l'objet de discussions ces dernières années, mérite d'être rapidement discuté. Notons d'abord que l'approximation de Thomas-Fermi $\tau(\rho) = \alpha \rho^{5/3}$ suppose que la surface de Fermi locale est sphérique. Or les symétries de la surface de Fermi sont celles de la transformée de Wigner de la densité à 1 corps non diagonale $\rho(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$:

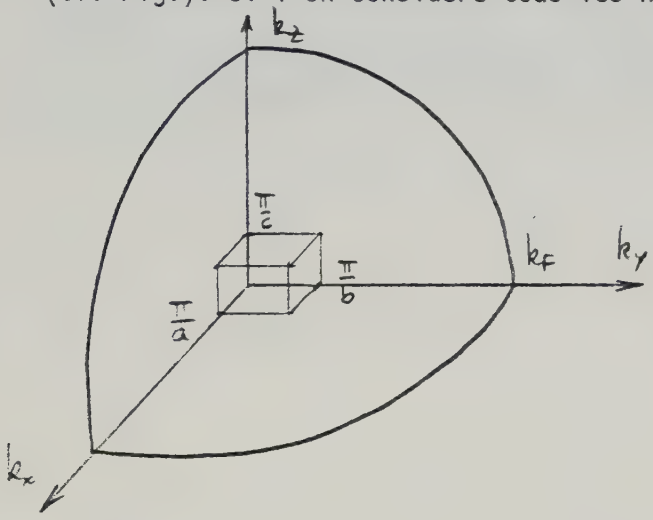
$$f(r, \vec{p}) = \int e^{i\vec{p}\vec{s}} \rho\left(\vec{r} + \frac{\vec{s}}{2}, \vec{r} - \frac{\vec{s}}{2}\right) d\vec{s} \qquad \text{(I-10)}$$

où $\vec{r} = \frac{\vec{r}_1 + \vec{r}_2}{2}$ et $\vec{s} = \vec{r}_1 - \vec{r}_2$

Si le milieu est homogène, $\rho\left(\vec{r} + \frac{\vec{s}}{2}, \vec{r} - \frac{\vec{s}}{2}\right)$ ne dépend plus de $\vec{r}$ et est à symétrie sphérique en $\vec{s}$, donc $f(\vec{r}, \vec{p})$ est à symétrie sphérique en $\vec{p}$. Sinon apparaissent des corrections d'inhomogénéité (cf.(I-2)). Si l'on considère maintenant un système quantique de taille finie, on sait qu'une déformation dans l'espace r induit une déformation de la surface de Fermi *tant que la déformation géométrique demeure suffisamment petite pour qu'il n'y ait pas de croisement de niveaux*. Celui-ci restaure ensuite la sphéricité

de la surface de Fermi.

Ceci peut se montrer aisément en considérant un système de fermions dans un puits infini parallélépipédique de dimensions (a,b,c). On sait que les états possibles, dans l'espace $\bar{k}$, sont représentés par les sommets du réseau parallélépipédique d'arêtes $\left(\frac{\pi}{a}, \frac{\pi}{b}, \frac{\pi}{c}\right)$. (cf. Fig.). Si l'on considère tous les niveaux intérieurs à la sphère du rayon k_F, où k_F est le moment de Fermi, on voit qu'une compression dans la direction Oz (c diminue) produit un accroissement conjugué de $\frac{\pi}{c}$, donc une déformation de la sphère dans la direction Oz (de l'espace $\bar{k}$) *tant que l'occupation des niveaux reste la même qu'initialement.* Au-delà d'une certaine déformation il y a croisement de niveaux et il devient plus favorable énergétiquement de dépeupler des niveaux dans la direction Oz pour en peupler dans les deux autres directions. L'enveloppe des niveaux remplis redevient donc sphérique. On voit donc que l'approximation semi-classique décrira mal le comportement *local* de la courbe d'énergie cinétique de déformation, mais reproduira bien la courbe *moyenne*. Autrement dit l'évaluation ETF des *forces de rappel* (liées à la dérivée seconde), pour des contraintes déformantes, est inexacte, mais non le calcul des *énergies moyennes de déformation*, nécessaire dans le calcul de la partie goutte liquide des barrières de fission {cf. [SH-78] [HE-78] [KTB-80], [J-80], [GB-80]}.



I.2.2 - La fonctionnelle MTF [Réf.3]

Puisque le paramètre β dans (I-2) gouverne la partie externe de la surface, il est intéressant de déterminer la valeur qui donne un meilleur profil (i.e. comparable à celui obtenu par un calcul HF utilisant la même interaction). On trouve une valeur

$$\beta \simeq \frac{1}{9}$$

avec une faible dépendance par rapport à la masse effective. Cette valeur, 4 fois plus grande que la valeur semi-classique, est intermédiaire entre cette dernière et celle que l'on obtient si l'on considère un système à une seule orbite, auquel cas on a exactement

$$\tau_q(\rho_q) = \frac{1}{4}\frac{(\nabla\rho_q)^2}{\rho_q}$$

Cette dernière remarque, ainsi que la constatation que la valeur $\beta = \frac{1}{3}$ conduit à une énergie de surface trop grande (voir également [CS-80]) nous a conduit à construire une fonctionnelle phénoménologique de la forme :

$$\tau_q(\rho_q) = \alpha(A_q)\rho_q^{5/3} + \beta\frac{(\nabla\rho_q)^2}{\rho_q} \qquad \text{(I-11)}$$

où A_q représente le nombre de nucléons de type q. La fonction $\alpha(A_q)$ est déterminée par ajustement sur les résultats HF. Le fait que l'on puisse trouver une fonction $\alpha(A_q)$, *indépendante de l'interaction utilisée*, qui donne un bon accord à la fois pour les propriétés intégrées (énergies) et les propriétés locales (notamment les diffusivités des densités) nous a conduit à rechercher une justification microscopique.

Nous avons cherché une telle justification à partir de la constatation que dans l'approximation TF, on remplace une sommation sur des états discrets par une intégrale dans la sphère de Fermi locale. La discussion qui suit montre que cette idée n'est pas la bonne -mais cette conclusion est également intéressante. Outre l'amusement de découvrir que cette discussion a déjà eu lieu, sous une forme différente à propos d'un autre enjeu, entre Feenberg et Swiatecki (de 1943 à 1951), celui provoqué par un détour empruntant des techniques d'arithmétique incite à un bref exposé de l'argument, à savoir : cette dépendence en A_q peut-elle apparaître si l'on tient compte exactement de la sommation sur des états discrets ?

Prenons l'exemple du puits infini à une dimension de largeur a (cf. [Pe 80]). Dans ce cas, on a (en mettant 1 particule par état) :

$$\rho(x) = \frac{2}{a} \sum_{1}^{N} \sin^2 \frac{n\pi x}{a} = \frac{N+\frac{1}{2}}{a} - \frac{\sin (2N+1)\pi \frac{x}{a}}{2a \sin \frac{\pi x}{a}} \qquad \text{(I-12)}$$

$$\tau(x) = \frac{2\pi^2}{a^3} \sum_{1}^{N} n^2 \cos^2 \frac{n\pi x}{a} = \frac{\pi^2}{a^3} \frac{N(N+1)(2N+1)}{6} + \frac{1}{4a\pi^2} \frac{d^2}{dx^2} \sum_{1}^{N} \cos \frac{2n\pi x}{a}$$

Puisque nous sommes intéressés à décrire les comportements moyens de $\rho(x)$ et $\tau(x)$ *au centre*, nous pouvons ignorer les termes qui oscillent autour de 0 dans les expressions ci-dessus. On considérera donc les quantités $\tilde{\rho}$ et $\tilde{\tau}$:

$$\tilde{\rho} = \frac{N+\frac{1}{2}}{a}$$

$$\tilde{\tau} = \frac{\pi^2}{6a^3} N(N+1)(2N+1) \qquad \text{(I-13)}$$

d'où

$$\tilde{\tau} = \frac{\pi^2}{6a^3} (a\tilde{\rho} - \tfrac{1}{2})(a\tilde{\rho} + \tfrac{1}{2}) 2a\tilde{\rho} = \frac{\pi^2}{3} \tilde{\rho}^3 \left(1 - \frac{1}{4N^2} + \sigma\left(\frac{1}{N^3}\right)\right) \qquad \text{(I-14)}$$

On voit donc que dans la relation $\tilde{\tau}(\tilde{\rho})$ *il n'y a pas de terme en* $\frac{1}{N}$, *i.e. pas de correction de surface* à l'approximation de TF. C'est pourtant un tel terme que nous cherchions. Cette expression est à comparer à celle que l'on obtiendrait en considérant la relation liant la densité d'énergie moyenne $\bar{\tau}$ et la densité moyenne $\bar{\rho}$:

$$\bar{\rho} = \frac{N}{a}$$

$$\bar{\tau} = \frac{1}{a} \sum_{1}^{N} \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2ma^2} = \frac{\pi^2}{3} \bar{\rho}^3 \left(1 + \frac{3}{2N} + \frac{1}{2N^2}\right) \qquad \text{(I-15)}$$

On voit donc que si dans (I-15) on a un terme correctif, dû à la taille finie du système, en $\frac{1}{N}$ à l'approximation de Thomas-Fermi pure, en considérant les quantités moyennes *au centre, et c'est bien là ce qu'il faut faire*, ce terme disparaît (il reste un terme correctif négatif) et donc l'approximation TF est bonne dans le volume.

L'extension au cas à 3 dimensions n'est pas triviale, puisqu'il faut alors effectuer le comptage dans un domaine sphérique. Bien sûr, les quantités analogues ρ et τ ont une composante moyenne régulière et une composante erratique en fonction du rayon de la sphère. En effet lorsqu'on augmente le rayon de la sphère de Fermi, le nombre de cubes contenu varie de façon très irrégulière. On peut néanmoins montrer [Kr-81] que les composantes moyennes $\tilde{\rho}$ et $\tilde{\tau}$ *au centre* du noyau sont de la forme :

$$\tilde{\rho} \simeq \frac{N}{V}\left[1+\frac{3}{4}\left(\frac{\pi}{3}\right)^{4/3}N^{-4/3}\right]$$
$$\tilde{\tau} \simeq \frac{3}{5}(3\pi^2)^{4/3}\left(\frac{N}{V}\right)^{5/3}\left[1+\frac{5}{4}\left(\frac{\pi}{3}\right)^{4/3}N^{-4/3}\right] \qquad \text{(I-16a)}$$

Ces relations sont obtenues en faisant l'hypothèse qu'il existe un développement de chacune des quantités en puissances de $N^{-1/3}$. Dû à la composante erratique, qui n'est petite qu'en valeur relative par rapport au terme dominant, ce développement n'a de sens que pour un nombre fini de termes (la détermination de ce nombre de termes significatifs est un problème arithmétique difficile). La technique utilisée pour obtenir les équations (I-16) est fondée sur le calcul de $r_3(k)$ et de $k\, r_3(k)$, où $r_3(k)$ représente le nombre de décompositions d'un entier k comme somme de trois carrés.

Les équations (I-16) montrent que la relation de TF :

$$\tilde{\tau} = \alpha\, \tilde{\rho}^{5/3} \qquad \text{(I-16b)}$$

est vérifiée à une très bonne approximation, puisque les termes correctifs n'apparaissent qu'à l'ordre $\frac{1}{N}$. Remarquons que dans un développement en puissances de $N^{-1/3}$, le terme en $N^{-1/3}$ est un terme de surface et le second (en $N^{-2/3}$) est un terme de courbure. Les deux termes sont absents dans la relation (I-16b), ce qui infirme donc l'idée de justifier ainsi la dépendance de α en A_q. (Au contraire entre la densité d'énergie *moyenne* et la densité *moyenne* existe une relation qui fait apparaître une correction de surface en $N^{-1/3}$, ainsi que des corrections d'ordre supérieur).

Bien que nous n'ayons pas trouvé de justification théorique à la fonctionnelle MTF à partir de développements pour un *grand nombre d'états*, il faut cependant noter que les noyaux réels nécessitent de considérer seulement un *petit nombre d'états* : par exemple il suffit

d'une quinzaine de niveaux du puits infini symétrique ,i.e. une sphère de Fermi de rayon $\sim 4 . \frac{\pi}{a}$, pour placer 200 nucléons (a désigne l'arête de la boite et $\frac{\pi}{a}$ la dimension de la maille élémentaire dans l'espace $\bar{k}$). Le très bon accord avec les résultats HF obtenu avec la fonctionnelle MTF incite donc à l'utiliser dans tous les cas où l'on sait que la fonctionnelle ETF introduit des erreurs systématiques perturbant la comparison avec des valeurs expérimentales : ce n'est généralement pas le cas pour des quantités intégrées (énergies, rayons carrés moyens.). C'est souvent le cas lorsque les propriétés géométriques de la surface nucléaire sont en jeu : notamment dans la discussion des propriétés macroscopiques des densités de niveaux excités (Chapitre III) et dans l'évaluation de la position de la résonance dipolaire géante (Chapitre IV).

Notons pour conclure que dans un travail récent, Campi et Stringari [CS-80], dans une étude des propriétés de surface des milieux semi-infinis à l'aide du formalisme EDF, construisent une fonctionnelle $\tau(\rho)$ pour l'énergie cinétique de la forme

$$\tau_q = \alpha \rho_q^{5/3} + \beta \frac{(\nabla \rho_q)^2}{\rho_q} + \gamma \Delta \rho_q \qquad \text{(I-17)}$$

en déterminant les coefficients β et γ par ajustement sur les densités d'énergie cinétique HF (calculées avec la même interaction). Ils trouvent que β et γ sont peu dépendants de l'interaction utilisée, et donnent les valeurs :

$$\beta \simeq \frac{1}{10} \qquad \gamma \simeq \frac{1}{3} \qquad \text{(I-18)}$$

La valeur de β est voisine de celle de la fonctionnelle MTF et celle de γ de la valeur semi-classique. Avec ces valeurs, de bonnes propriétés géométriques de la surface sont obtenues (cf. également le chapitre II). mais, comme on s'y attend, l'énergie de surface calculée de manière self-consistante est trop élévée ($\sim$ 25 %) : β est en effet 4 fois plus grand que la valeur semi-classique et α est constant (contrairement à la fonctionnelle MTF).

Résumons les conclusions des deux précédentes sections.

La paramétrisation de type Skyrme et l'utilisation de l'approximation semi-classique à l'ordre 2 en $\hbar$ pour la densité d'énergie cinétique conduit à exprimer l'énergie du noyau comme fonctionnelle des densités ρ_n et ρ_p et de leurs dérivées; nous écrirons :

$$E = \int \mathcal{H}\, d\vec{r} = \sum_{q=n,p} \left(\frac{\hbar^2}{2m^*_q} \tau_q + V_{so} \frac{\rho_q (\vec{\nabla}\rho_q)^2}{f_q} \right) + \frac{t_0}{2}\left[\left(1+\frac{x_0}{2}\right)\rho^2 - \left(x_0+\frac{1}{2}\right)\left(\rho_n^2+\rho_p^2\right)\right]$$

$$+ \frac{t_3}{12}\rho^\sigma \left[\left(1+\frac{x_3}{2}\right)\rho^2 - \left(x_3+\frac{1}{2}\right)\left(\rho_n^2+\rho_p^2\right)\right]$$

$$+ \frac{1}{16}\left[3t_1\left(1+\frac{x_1}{2}\right) - t_2\left(1+\frac{x_2}{2}\right)\right](\vec{\nabla}\rho)^2 - \frac{1}{16}\left[3t_1\left(\frac{1}{2}+x_1\right) + t_2\left(\frac{1}{2}+x_2\right)\right](\vec{\nabla}\rho_n^2+$$

$$\frac{\hbar^2}{2m^*_q} = \frac{\hbar^2}{2m} + \frac{1}{4}\left[t_1\left(1+\frac{x_1}{2}\right) + t_2\left(1+\frac{x_2}{2}\right)\right]\rho + \frac{1}{4}\left[t_2\left(\frac{1}{2}+x_2\right) - t_1\left(\frac{1}{2}+x_1\right)\right]\rho_q$$

$$f_q = \frac{m}{m^*_q}$$

$$V_{so} = -\frac{9}{32}(W_0)^2 \frac{2m}{\hbar^2} \qquad (\text{I-19})$$

et τ_q donné par l'équation (I-2).

La minimisation de l'énergie du système sous contrainte de normalisation des densités de neutrons et de protons au bon nombre de particules conduit à 1 système de deux équations d'Euler couplées :

$$\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \rho_q} - \vec{\nabla}\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \vec{\nabla}\rho_q} + \Delta \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \Delta \rho_q} = \lambda_q \qquad q = n,p$$

où λ_n et λ_p sont les deux multiplicateurs de Lagrange correspondant aux deux contraintes imposées.

Le formalisme EDF ainsi construit est dénommé ITF dans les réfs.[2,3,4] : Improved Thomas-Fermi.

I.3 Liaison avec le modèle et les coefficients de la Gouttelette Liquide (Droplet Model)

Il sera souvent utile dans le chapitre II d'utiliser pour la partie de volume $H(\rho)$ de la fonctionnelle, au lieu de son expression

exacte tirée de (I-19), une expression approchée obtenue par développement au 3ème ordre autour de la densité de saturation ; on écrira donc, dans le cas $\rho_n = \rho_p$:

$$\mathcal{H}(\rho) = H(\rho) \quad + \text{(termes gradients exacts de I-19)}$$

$$\frac{H(\rho)}{\rho} = \lambda_{nm} + \frac{K}{18}\left(\frac{\delta\rho}{\rho_{nm}}\right)^2 + \frac{1}{6}\left(\rho_{nm}^2 H''' - \frac{K}{3}\right)\left(\frac{\delta\rho}{\rho_{nm}}\right)^3 \qquad \text{(I-20) a)}$$

$$\delta\rho = \rho - \rho_{nm}$$

où l'incompressibilité K est donnée par :

$$K = 9\,\rho_{nm}\left.\frac{\partial^2 H}{\partial\rho^2}\right|_{\rho=\rho_{nm}} = 9\,\rho_{nm}^2\left.\frac{\partial^2 H/\rho}{\partial\rho^2}\right|_{\rho=\rho_{nm}} \qquad \text{(I.20.b)}$$

et où

$$H''' = \left.\frac{\partial^3 H}{\partial\rho^3}\right|_{\rho=\rho_{nm}} \qquad \text{(I.20.c)}$$

Rappelons qu'il existe, toutes choses égales par ailleurs, une corrélation entre K et $\rho_{nm}^2 H'''$; celle-ci s'exprime dans la relation (cf. app.C de la réf.[6]) :

$$\rho_{nm}^2 H''' \simeq \frac{K}{2} - 45 \quad [\text{MeV}]$$

Cette quantité, qui n'apparaît pas dans le Modèle de la Gouttelette de Myers et Swiatecki, doit être prise en compte dans l'étude de la compressibilité nucléaire : dans la mesure où, à cause de la compression exercée par la surface, la densité ρ_o au centre du noyau est plus grande que la densité de saturation de la matière nucléaire ρ_{nm} (cf. section II.2.1), *la résistance du volume à cette compression n'est pas caractérisée par la valeur de l'incompressibilité K donnée par (I.20b) mais par une valeur plus élevée* d'une quantité :

$$\delta K = \left.\frac{\partial K}{\partial \rho}\right|_{\rho_{nm}} \delta\rho = \rho_{nm} \left.\frac{\partial K}{\partial \rho}\right|_{\rho_{nm}} \frac{\delta\rho}{\rho_{nm}}$$

où $\delta\rho = \rho_o - \rho_{nm}$ représente l'accroissement de la densité au centre. Or :

$$\left.\frac{\partial K}{\partial \rho}\right|_{\rho_{nm}} = 9 \left.\frac{\partial^2 H}{\partial \rho^2}\right|_{\rho_{nm}} + 9\rho_{nm} H''' = \frac{1}{\rho_{nm}} \left(K + 9\rho_{nm}^2 H'''\right) \simeq \frac{1}{\rho_{nm}} \left(\frac{11}{2} K - 405\right)$$

$$\frac{\delta\rho}{\rho_{nm}} \simeq 6 \frac{\varepsilon_s}{K} A^{-1/3} \qquad (\text{cf. éq. } \Sigma\ 89)$$

où ε_s désigne l'énergie de surface de la formule de masse. On obtient alors :

$$\delta K = \left(\frac{11}{2} K - 405\right) \frac{6\varepsilon_s}{K} A^{-1/3}$$

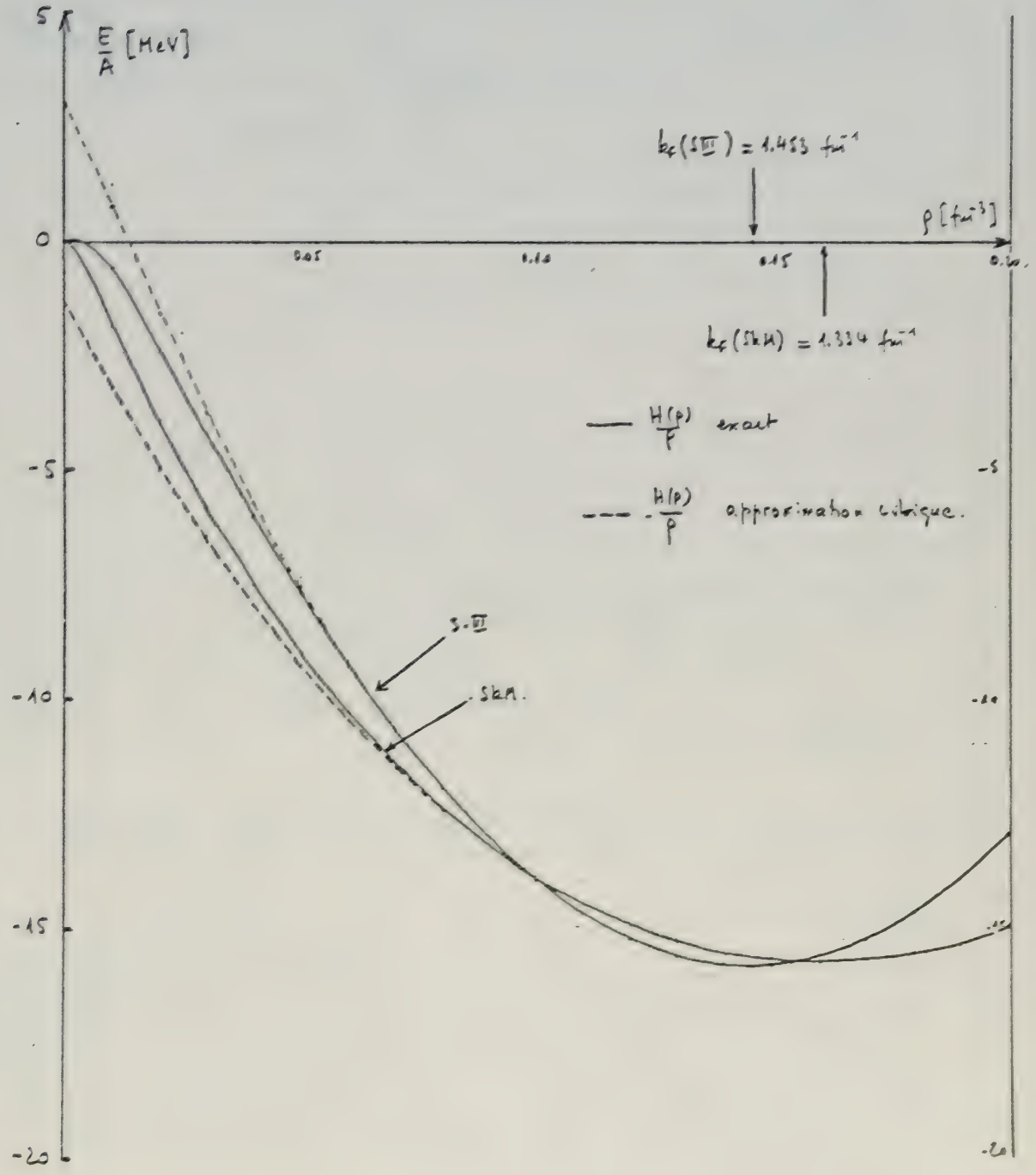
Choisissons $\varepsilon_s \simeq 20$ MeV et $K \simeq 200$ MeV ; on trouve :

$$\delta K \simeq 420\ A^{-1/3}$$

Soit

$$\delta K = 70 \text{ MeV dans le Pb}$$
$$\delta K = 95 \text{ MeV dans le Zr.}$$

On voit que ces variations ($\frac{\delta K}{K} \simeq$ 40 %) ne sont pas négligeables si l'on prétend faire une analyse fine de l'incompressibilité d'un noyau fini (cf. [Bl-80], [BG-81], [JJ-80] et réf. [6]).
On compare dans la figure suivante les courbes de saturation dans la matière nucléaire, exactes et approchées.


5
$\frac{E}{A}$ [MeV]
$k_f(S\text{III}) = 1.453\ fm^{-1}$
$\rho\ [fm^{-3}]$
0
0.05
0.10
0.15
0.20
$k_f(SkM) = 1.334\ fm^{-1}$
$\frac{H(\rho)}{\rho}$ exact
$-\frac{H(\rho)}{\rho}$ approximation cubique.
-5
S-III
SkM.
-10
-15
-20

De même, dans l'étude des propriétés de symétrie de l'interaction ($\rho_n \neq \rho_p$) , on utilisera, au lieu de l'expression exacte de l'énergie de symétrie de volume :

$$\varepsilon_\delta(\rho) = \frac{1}{2}\rho \left.\frac{\partial^2 H(\rho_n,\rho_p)}{\partial \rho_-^2}\right|_{\rho \text{ constant}}$$

$$\rho_- = \rho_n - \rho_p \ ,$$

le développement au second ordre :

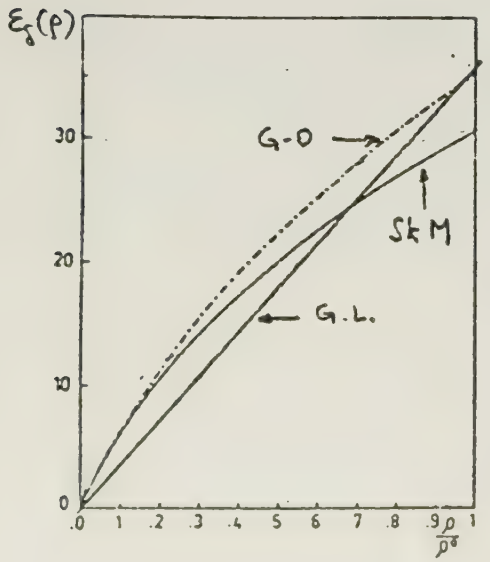
$$\varepsilon_\delta(\rho) = \varepsilon_\delta^v + \frac{L}{3}\frac{\delta\rho}{\rho_m} + \frac{K_{sym}}{18}\left(\frac{\delta\rho}{\rho_m}\right)^2 \qquad \text{(I-21a)}$$

$$L = 3\rho_m \left.\frac{\delta\varepsilon_\delta(\rho)}{\partial\rho}\right|_{\rho=\rho_m} \qquad \text{(I-21b)}$$

$$K_{sym} = 9\rho_m^2 \left.\frac{\partial^2\varepsilon_\delta(\rho)}{\partial\rho^2}\right|_{\rho=\rho_m} \qquad \text{(I-21c)}$$

Dans (I-21), le terme ε_δ^v représente l'énergie de symétrie de volume de la formule de masse.

La figure et la tableau suivants illustrent les propriétés de symétrie de différentes interactions : SkM, S-III et G-O. On a



	SkM	S-III	G-O	GL
ε_δ^v	30.7	28.2	35.5	36.8
L	49.3	9.9	79.3	110.4
K_{sym}	-148.8	-393.7	(≈-100)	0

rajouté pour comparaison la droite correspondant au modèle de Gouttelette (colonne libellée G L, réf. [My-Sw-74]). On a ainsi un éventail assez large de cas (de 28.2 à 36.8 MeV pour ε_δ^v). La fonction $\varepsilon_\delta(\rho)$, nous allons la discuter rapidement, est au centre de la discussion des propriétés de symétrie (volume *et surface*) de l'interaction effective.

Notons d'abord que cette courbe est régulière et qu'on peut déduire de cette remarque une relation approchée entre ε_δ^v , L et K_{sym} en imposant $\varepsilon_\delta(0) = 0$ dans (I-21.a). On trouve :

$$K_{sym} \simeq 6\,(L - 3\,\varepsilon_\delta^v) \qquad \text{(I-22)}$$

On verra dans la section II.1.3 que la contribution à l'énergie de surface des termes de volume de la fonctionnelle (I-19) *est égale* à celle des termes en gradients. Il suffit donc de la doubler pour avoir la contribution totale. Dans la section (II.1.4) on montrera que pour évaluer la contribution à l'énergie de symétrie des termes *de volume*, on peut faire l'approximation de proportionnalité des densités de neutrons et de protons ; en utilisant le développement leptodermique (cf. section suivante I.4), les contributions du potentiel de symétrie à l'énergie totale s'écrivent alors (cf. eq.II-86) :

$$I^2 A\left[\varepsilon_\delta^v - \frac{2t}{r_0}\left(L - \frac{K_{sym}}{12}\right)A^{-1/3}\right] \simeq I^2 A\left[\varepsilon_\delta^v - \frac{t}{r_0}\left(L + 3\varepsilon_\delta^v\right)A^{-1/3}\right] \qquad \text{(I-23)}$$

où t représente la diffusivité de la distribution de matière, prise comme une distribution de Fermi et I = (N-Z)/A. On a utilisé, pour obtenir la seconde forme de (I-23), l'équation (I.22). Cette seconde forme montre clairement la corrélation entre énergie de symétrie de surface et énergie de symétrie de volume, toutes deux étant reliées à des propriétés de *volume* : ε_δ^v et L (la diffusivité t dépend évidemment des termes en gradients de la fonctionnelle). On comprend également comment des interactions ayant des propriétés de symétrie significativement différentes fournissent pourtant une description des masses de qualités semblables : les propriétés statiques des noyaux déterminent seulement une certaine relation

entre ε_δ^v et L. (Bien sûr la discussion n'est ici que qualitative.)

Nous montrerons au chapitre IV, en prolongeant l'analyse de la réf.[5], que la position de la résonance dipolaire est peu sensible à ε_δ^v mais très sensible à la valeur de $\varepsilon_\delta(\rho \simeq \rho_{nm}/2)$. On aura ainsi une information complémentaire -et indépendante- sur L et K_{sym}.

La discussion précédente permet une évaluation rapide et simple de la contribution à l'incompressibilité nucléaire du potentiel d'asymétrie, K_δ^v. On remarque dans la réf.[6] que la plupart des interactions communément utilisées conduisent à une valeur de K_δ^v négative et peu dépendante de l'interaction. Ceci se comprend aisément.

En effet, partant de l'expression suivante de K_δ^v (cf.[BG-81]) :

$$K_\delta^v = K_{sym} + 3L - 27L \frac{\rho_{nm}^v H'''}{K}$$

et utilisant l'équation (I-22) et la relation

$$\rho_{nm}^v H''' \simeq \frac{K}{2} - 45 \quad [MeV] \qquad \text{(cf. app. C de la réf.[6])}$$

on trouve :

$$K_\delta^v = 9L - 18\varepsilon_\delta^v - 27L\left(\frac{1}{2} - \frac{45}{K}\right)$$

Soit, pour K = 360 MeV $\qquad K_\delta^v \simeq -L - 18\varepsilon_\delta^v$

et pour K = 220 MeV $\qquad K_\delta^v \simeq L - 18\varepsilon_\delta^v$

Pour $\varepsilon_\delta^v = 28 \tilde{a} 32$ MeV et $L = 10 \tilde{a} 100$ MeV, on trouvera donc toujours $K_\delta^v < 0$ avec une faible corrélation avec l'incompressibilité K. Il nous paraît en conséquence que le calcul de P. Haensel [Ha-80] dans lequel une valeur *positive* est trouvée pour K_δ^v est sujet à caution. Il implique en effet que la courbe $\varepsilon_\delta(\rho)$ dans la matière nucléaire est très différente de celles représentées dans la figure ci-dessus -tout au moins que l'approximation quadratique est mauvaise pour la représenter.

Nous terminerons cette section en donnant les

expressions exactes des différentes grandeurs que nous venons de discuter :

$$K = -2\frac{\hbar^2}{2m}\alpha\rho_{nm}^{2/3}\left(1-\frac{5}{16}\frac{2m}{\hbar^2}\left[3t_1+t_2\left(5+4x_2\right)\right]\rho_{nm}\right)+\frac{9}{16}\left(1+\sigma\right)\sigma t_3\rho^{1+\sigma} \qquad \text{(I-24)}$$

$$\rho_{nm}^2 H''' = -\frac{10}{27}\frac{\hbar^2}{2m}\alpha\rho_{nm}^{2/3}\left(1-\frac{1}{2}\frac{2m}{\hbar^2}\left[3t_1+t_2\left(5+4x_2\right)\right]\rho_{nm}\right)+\frac{\left(2+\sigma\right)\left(1+\sigma\right)\sigma}{16}t_3\rho^{1+\sigma} \qquad \text{(I-25)}$$

$$\varepsilon_0^V = \frac{5}{9}\frac{\hbar^2}{2m}\alpha\rho_{nm}^{2/3}-\frac{t_0}{4}\left(x_0+\frac{1}{2}\right)\rho_{nm}-\frac{t_3}{24}\left(x_3+\frac{1}{2}\right)\rho^{1+\sigma}+\frac{5}{72}\left[t_2\left(4+5x_2\right)-3t_1x_1\right]\alpha\rho_{nm}^{5/3} \qquad \text{(I-26)}$$

$$L = \frac{10}{9}\frac{\hbar^2}{2m}\alpha\rho_{nm}^{2/3}-\frac{3}{4}t_0\left(x_0+\frac{1}{2}\right)\rho_{nm}-\left(1+\sigma\right)\frac{t_3}{8}\left(x_3+\frac{1}{2}\right)\rho_{nm}^{1+\sigma}+\frac{25}{72}\left[t_2\left(4+5x_2\right)-3t_1x_1\right]\alpha\rho_{nm}^{5/3} \qquad \text{(I-27)}$$

$$K_{sym} = -\frac{10}{9}\frac{\hbar^2}{2m}\alpha\rho_{nm}^{2/3}-3\frac{\left(1+\sigma\right)\sigma}{8}t_3\left(x_3+\frac{1}{2}\right)\rho_{nm}^{1+\sigma}+\frac{50}{72}\left[t_2\left(4+5x_2\right)-3t_1x_1\right]\alpha\rho_{nm}^{5/3} \qquad \text{(I-28)}$$

I.4 - Le développement leptodermique [Réf.7]

L'intérêt principal du formalisme EDF, outre qu'il permet une résolution self-consistante approchée des équations de HF, réside en ce que les grandeurs physiques peuvent toujours s'exprimer comme fonctionnelles de la densité, sous la forme :

$$\mathcal{F} = \int F(\rho, \rho', \rho'')\, d\vec{r} \qquad (I\text{-}28)$$

Due à la propriété de saturation des forces nucléaires, qui fait que la densité au centre varie (peu) avec le nombre de masse A, une telle intégrale peut être développée en puissances d'un paramètre *petit* : le quotient de l'épaisseur de surface à la taille du noyau. Un tel développement, dit "développement leptodermique", peut être obtenu analytiquement si l'on suppose que l'on peut représenter la densité $\rho(r)$ par ce que nous conviendrons de noter "(Fermi)$^\nu$ ", à savoir une distribution de la forme :

$$\rho = \rho_0 f^\nu$$

$$f = \frac{1}{1 + \exp \frac{r-R}{t}} \qquad (I\text{-}29)$$

On montre en effet dans la réf.7 qu'une intégrale de la forme :

$$I_{\nu\mu} = \int \frac{r^\mu\, dr}{\left(1 + \exp \frac{r-R}{t}\right)^\nu}$$

admet le développement leptodermique :

$$I_{\nu\mu} = \frac{R^{\mu+1}}{\mu+1}\left[1 + P_{\nu\mu}(x)\, x + \omega_{\nu\mu}(x)\right] \qquad (I\text{-}30)$$

$$x = \frac{t}{R}$$

où $P_{\nu\mu}(x)$ est un polynome de d° μ en x et où $\omega_{\nu\mu}(x) \sim e^{-\frac{1}{x}}$ quand x est petit.

Les expressions analytiques des coefficients du polynôme $P_{\nu\mu}(x)$ sont données dans la référence [7].

Du développement (I-30), on conçoit que l'on puisse déduire le développement de (I-28) en puissances de $A^{-1/3}$: il suffit pour cela d'établir les relations existant entre ρ_0 , R et t en fonction de A. Ces relations sont données dans la section (II.2).

Le développement leptodermique sera utilisé systématiquement dans les chapitres qui suivent. Au lieu d'une résolution self-consistante, on peut effectuer un calcul variationnel restreint en variant sur ρ_0 , R et t le développement de l'énergie du noyau : on montre dans le chapitre II que le choix de la forme (I-29) est justifié -par comparaison avec la résolution exacte dans le milieu semi-infini- et on obtient alors des expressions analytiques simples et compactes des différentes propriétés nucléaires moyennes.

CHAPITRE II

LA SURFACE NUCLÉAIRE

L'aspect le plus notable de la surface d'un système quantique est peut être l'existence d'une épaisseur de surface, distance au cours de laquelle la densité passe de sa valeur au centre à une valeur voisine de zéro. Le caractère quantique de l'épaisseur de surface peut être illustré par la considération d'un ensemble de particules plongé dans un puits de potentiel. Dans le cas classique, rien n'impose que la densité s'annule au point tournant; dans le cas quantique, la possibilité de pénétration dans la zone classiquement interdite implique un comportement asymptotique des fonctions d'onde exponentiellement décroissant. Dans le cas classique, la diffusivité de la surface est liée à la diffusivité du potentiel (cf. par exemple l'atmosphère terrestre dans le champ de gravitation) alors que, quantiquement, même dans le cas d'un mur de potentiel infini, la densité aura une surface diffuse.

C'est l'objet de ce chapitre que de présenter une étude du profil nucléaire ainsi qu'une méthode de calcul des principales grandeurs attachées à la surface : l'énergie de surface et l'énergie de symétrie de surface. Dans la section II.1 on considère le milieu semi-infini, dans lequel la dissymétrie interne-externe du profil de la surface peut être étudiée analytiquement (section II.1.1). Cette étude sert ensuite (section II.1.2) à obtenir des expressions approchées pour l'épaisseur de la surface et pour l'énergie de surface, où l'on met en évidence le rôle des différents paramètres de l'interaction. L'extension au cas $N \neq Z$ (section II.1.3) permet un calcul de l'énergie de symétrie de surface et une étude détaillée de l'évolution des diffusivités des distributions de neutron et de proton en fonction de l'asymétrie $I = \frac{N-Z}{A}$.

Enfin dans la courte section II.2 on montre que les corrections à apporter lorsqu ' on passe du milieu semi-infini aux noyaux finis sont petites et que les résultats de la section II.1 restent valables. On discute également l'effet de l'interaction coulombienne sur les propriétés géométriques des densités. On compare avec d'autres approches -plus microscopique ou plus macroscopique.

II.1 Où le milieu est semi-infini

II.1.1 - De la dissymétrie de la surface nucléaire

On sait ([Be-68] et références incluses) que dans le milieu semi-infini avec N = Z, la densité $\rho(x)$ s'obtient par une simple quadrature. En effet, l'équation d'Euler correspondant à la minimisation de l'énergie (on négligera dans ce chapitre les corrections de masse effective à la fonctionnelle $\tau(\rho)$) :

$$E = \int \mathcal{H}(\rho, \nabla\rho)\, d\vec{r} = \int H(\rho) + \frac{\hbar^2}{2m}\beta\frac{(\nabla\rho)^2}{\rho} + d\,(\nabla\rho)^2 + V_{so}\rho(\nabla\rho)^2 \qquad (1)$$

$$d = \frac{1}{64}\left[9t_1 - (5+4x_2)t_2\right] + \frac{1}{16}(\beta-\gamma)\left[3t_1 + t_2(5+4x_2)\right]$$

s'écrit :

$$\frac{\partial H}{\partial\rho} + \frac{\hbar^2}{2m}\beta\left[\frac{\rho'^2}{\rho^2} - 2\frac{\Delta\rho}{\rho}\right] - 2d\,\Delta\rho - V_{so}\rho'^2 - 2V_{so}\rho\,\Delta\rho = \lambda \qquad (2)$$

A la limite "semi-infinie", $\Delta\rho = \rho''$ et le problème est réduit à 1 dimension. On choisira dans la suite de placer la matière dans la région $x < 0$. Après multiplication par $\rho'(x)$ et intégration entre $+\infty$ et x, on obtient :

$$H(\rho) - \frac{\hbar^2}{2m}\beta\frac{\rho'^2}{\rho} - d\rho'^2 - S\rho\rho'^2 = \lambda\rho \qquad (3)$$

A l'intérieur, les termes dérivatifs sont nuls et $\rho = \rho_{nm}$, d'où

$$\lambda = \lambda_{nm} \equiv \frac{H(\rho_{nm})}{\rho_{nm}} = \left(\frac{E}{A}\right)_{nm} \qquad (4)$$

La densité est obtenue par intégration de l'équation :

$$\rho' = -\sqrt{\frac{H(\rho) - \lambda_{nm}\rho}{\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\beta}{\rho} + d + S\rho}} \qquad (5)$$

Si l'on néglige le terme spin-orbite et qu'on utilise l'approximation cubique discutée dans la 1ère partie pour la partie de volume $\frac{H(\rho)}{\rho}$, on peut effectuer l'intégration de l'équation (5)

analytiquement (R. Caté 1981). On définit :

$$a = \sqrt{\frac{18\left(\frac{\hbar^2}{2m}\beta + d\rho_{nm}\right)}{K}} \tag{6.a}$$

$$b = \frac{d\rho_{nm}}{\frac{\hbar^2}{2m}\beta + d\rho_{nm}} \tag{6.b}$$

$$c = 3\,\frac{\rho_{nm}^2 H'''}{K} - 1 \tag{6.c}$$

et en utilisant pour $H(\rho)$ l'équation (I-20)

$$H(\rho) = \rho\left[\lambda_{nm} + \frac{K}{18}\left(\frac{\delta\rho}{\rho_{nm}}\right)^2 + \frac{1}{6}\left(\rho_{nm}^2 H''' - \frac{K}{3}\right)\left(\frac{\delta\rho}{\rho_{nm}}\right)^3\right] \tag{7}$$

l'équation (5) s'écrit ; dans le cas $b \neq c$ [1] :

$$\frac{x}{a} = \int \frac{dy}{y(1+y)}\sqrt{\frac{1+by}{1+cy}} \quad , \quad y = \frac{\delta\rho}{\rho_{nm}} = \frac{\rho-\rho_{nm}}{\rho_{nm}} \tag{8}$$

(l'origine est arbitraire, et on a choisi de placer la matière à gauche). On pose

$$u^2 = \frac{1+by}{1+cy}$$

et la solution s'obtient sous la forme :

$$\frac{x}{a} = \log\left[\left(\frac{\nu u+1}{\nu u-1}\right)^{\frac{1}{\nu}}\frac{1-u}{1+u}\right] \tag{9.a}$$

$$\nu = \sqrt{\frac{1-c}{1-b}} \tag{9.b}$$

Cette solution perd son opacité dans les 2 régions asymptotiques : l'intérieur, où y est petit ; l'extérieur, où y est proche de -1.
A l'intérieur,

$$y \sim \varepsilon$$

$$u^{\nu} \sim 1 + (b-c)\,\varepsilon \qquad \Rightarrow \qquad u \sim 1 + \frac{b-c}{\nu}\,\varepsilon$$

et en reportant dans (9), il vient :

$$\rho(x) \simeq \rho_{um}\left[1 - \frac{4}{b-c}\left(\frac{\nu-1}{\nu+1}\right)^{\frac{1}{\nu}} e^{\frac{x}{a}}\right] \tag{10.a}$$

A l'extérieur,

$$y \sim -1 + \varepsilon$$

$$u^{\nu} \sim \frac{1-b}{1-c} + \frac{b-c}{(1-c)^{\nu}}\,\varepsilon \qquad \Rightarrow \qquad u \sim \frac{1}{\nu}\left[1 + \frac{b-c}{2(1-b)(1-c)}\,\varepsilon\right]$$

et, en reportant dans (9), il vient :

$$\rho(x) \sim \rho_{um}\,\frac{4}{b-c}\,(1-b)(1-c)\left(\frac{\nu-1}{\nu+1}\right)^{\nu} e^{-\nu\frac{x}{a}} \tag{10.b}$$

Le mérite des expressions (10.a) et (10.b) est de montrer la dissymétrie interne-externe du profil de la surface. Une distribution symétrique comme celle de Fermi

$$\rho(x) = \rho_{um}\, f(x) = \frac{\rho_{um}}{1 + \exp\frac{x}{t}} \tag{11}$$

se comporte à l'intérieur ($x \to -\infty$) comme :

$$\rho(x) \sim \rho_{um}\left(1 - \exp\frac{x}{t}\right)$$

et à l'extérieur ($x \to +\infty$) comme :

$$\rho(x) \sim \rho_{nm}\, e^{-\frac{x}{t}}$$

La solution (9) possède en quelque sorte 2 diffusivités : une diffusivité *interne* t_{in} et une *externe* t_{out}, définies par :

$$t_{in} = a \tag{12.a}$$

$$t_{out} = \frac{a}{\nu} \tag{12.b}$$

On peut d'ailleurs remarquer que la solution exacte de l'équation (3) dans la région asymptotique (où -contrairement à la forme approximative (7)- le rapport $\frac{H(\rho)}{\rho} \to 0$) est donnée par :

$$\rho(x) \sim \exp - \sqrt{-\frac{2m}{\hbar^2}\frac{\lambda_{nm}}{\beta}}\, x$$

ce qui correspond à une valeur de la diffusivité externe

$$t'_{out} = \sqrt{-\frac{\hbar^2 \beta}{2m\, \lambda_{nm}}} \tag{13}$$

L'estimation donnée par t_{out} est cependant meilleure, puisqu'elle contient plus d'information sur l'interaction ($H(\rho)/\rho \neq 0$) qui joue certainement encore un rôle dans la partie externe de la surface.

Un tel comportement dissymétrique de la densité de matière est reproduit par la $\nu^{\text{ième}}$ puissance d'une distribution de Fermi :

$$\rho(x) = \rho_{nm}\, [f(x)]^{\nu} = \frac{\rho_{nm}}{\left(1+\exp\frac{x}{t}\right)^{\nu}} \tag{14}$$

On a alors :

$$t = t_{in} = a$$
$$t_{out} = \frac{t_{in}}{\nu} \qquad (15)$$

Le tableau suivant compare les valeurs obtenues pour les interactions SkM et S-III et diverses approximations pour la fonctionnelle d'énergie cinétique. On donne aussi les valeurs du rapport :

$$\nu' = \frac{t_{in}}{t'_{out}}$$

	ITF		MTF		C-S	
	SkM	S-III	SkM	S-III	SkM	S-III
$a\ (\equiv t_{in})$	0.868	0.627	1.048	0.786	0.954	0.702
b	0.936	0.926	0.819	0.809	0.811	0.787
c	-0.198	0.032	-0.198	0.032	-0.198	0.032
d	52.92	49.41	67.52	67.95	55.42	52.62
ν	4.34	3.61	2.57	2.25	2.52	2.13
t_{out} (éq.13.a)	0.200	0.174	0.408	0.349	0.379	0.329
t'_{out} (éq.12.c)	0.191	0.191	0.390	0.383	0.363	0.362
ν'	4.54	3.29	2.69	2.05	2.63	1.94

L'examen des lignes ν (et ν') montre qu'on obtient une plus grande asymétrie de la surface avec SkM qu'avec S-III ; cela s'explique par la plus faible incompressibilité (216 MeV au lieu de 356 MeV): le paramètre a, qui gouverne principalement la partie interne de la surface (toutes choses égales par ailleurs) varie comme $\frac{1}{\sqrt{K}}$.

Les valeurs de ν à l'approximation ITF -qui expriment une très forte asymétrie de la surface- sont significatives de celles qui seraient obtenues pour d'autres interactions. En effet en utilisant la relation semi-empirique (cf. App.C de la réf.[6])

$$\rho_{nm}^2 H''' \sim \frac{\pi}{2} - 45 \quad [MeV]$$

on voit que

$$c = \frac{3}{K} \rho_{nm}^2 H''' - 1 \simeq \frac{1}{2} - \frac{135}{K} \ll 1 \qquad (16)$$

D'autre part, en écrivant :

$$b = \frac{1}{1 + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\beta}{d\rho_{nm}}} \qquad (17)$$

on obtient des valeurs $0.9 < b < 1$, dues à la (petite) valeur $\beta = \frac{1}{36}$ de l'approximation ITF. En reportant dans (9.b), on obtient $\gamma > 3$. Cependant on sait que la valeur semi-classique $\beta = 1/36$ conduit à une décroissance trop rapide de la densité à l'extérieur (comparativement à des densités HF). Les valeurs de ν obtenues ($\nu > 3$) exagèrent donc certainement la dissymétrie de la surface nucléaire.

Les valeurs correspondant aux approximations construites pour mieux reproduire les profils de surface HF (densité de matière et d'énergie cinétique) -MTF et C.S- sont probablement plus réalistes. Elles

confirment néanmoins la nette asymétrie de la surface du milieu infini. Les conséquences sur les profils dans les noyaux finis seront analysées dans la section II.2.

La comparaison entre la solution donnée par l'équation (9) pour les forces S-III et SkM et les distributions (14) utilisant respectivement les valeurs (9b) et (15) est faite Fig. II.1. Il ressort que l'accord est, comme on s'y attend, très bon à l'intérieur et moins bon à l'extérieur, notamment pour la force ayant la plus faible incompressibilité. Cela s'explique par le fait que le raccordement des solutions asymptotiques exactes (cf. Eqs.(10.a) et (10.b)) ne s'opère pas de la même façon que dans la représentation approchée par un (Fermi)$^\nu$. On verra néanmoins qu'en utilisant un *calcul variationnel restreint avec la forme* (Fermi)$^\nu$, on a un très bon accord d'ensemble du profil de la surface.

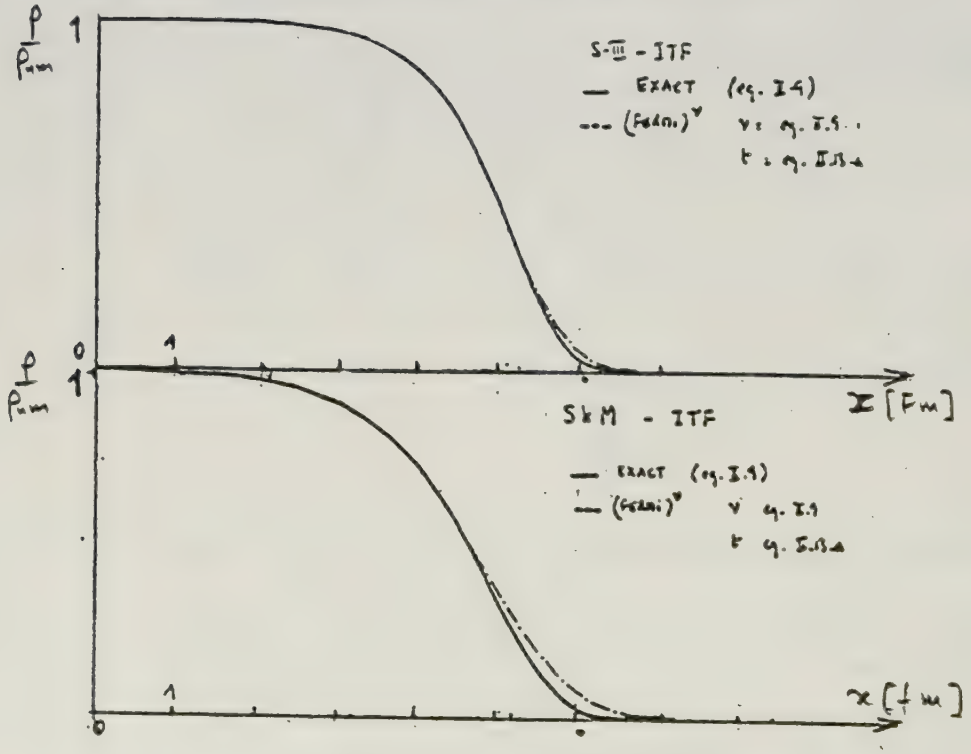


Fig. II.1

La détermination de la position du point d'inflexion de la densité fournit une analyse complémentaire-quoique moins significative, puisque plus locale-du profil de la surface.

Si l'on reprend l'équation (2) à la limite semi-infinie où $\Delta\rho = \rho''$, le point d'inflexion est défini par :

$$\rho'^2 = \frac{\lambda_{nm} - \frac{\partial H}{\partial \rho}}{\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\beta}{\rho^2} - S} \qquad (18)$$

Une seconde relation est fournie par l'équation (5) :

$$\rho''^2 = \frac{H(\rho) - \lambda_{nm}\rho}{\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\beta}{\rho} + d + S\rho}$$

En utilisant l'expression (7) pour H(ρ), on trouve que la densité correspondant au point d'inflexion est solution de l'équation (pour $Y_{S_0} = 0$) :

$$4cy^3 + \left(\frac{5c}{b} + 2c + 3\right)y^2 + \left(\frac{3c+4}{b} + 1\right)y + \frac{2}{b} = 0 \qquad (19)$$

$$y = \frac{\rho - \rho_{nm}}{\rho_{nm}}$$

où b et c sont donnés par (6.b) et (6.c).
A l'approximation ITF, on trouve

y = - 0.627 pour S-III
y = - 0.645 pour SkM

Utilisant l'approximation de Campi-Stringari, on obtient :

y = - 0.587 pour S-III
y = - 0.606 pour SkM

A l'approximation MTF, on a :

y = - 0.592 pour S-III
y = - 0.607 pour SkM

Notons que l'interaction qui a un module d'incompressibilité plus faible donne un profil plus dissymétrique. Le point d'inflexion de la puissance ν d'une distribution de Fermi (cf. eq.14) est déterminé

par la condition :

$$\rho'' = 0 = \rho_{um} \nu f^{\nu} \frac{f-1}{t^2} \left[(\nu-1)(f-1) + 2f - 1 \right]$$

soit : $$f(x_i) = \frac{\nu}{\nu+1}$$

et $$\frac{\rho(x_i)}{\rho_{um}} = \left(\frac{\nu}{\nu+1} \right)^{\nu} \qquad (20)$$

On a vu ci-dessus que $\frac{\rho(x_i)}{\rho_{um}}$ était de l'ordre de 0.35-0.45. Quand ν varie de 1 à l'infini, $\frac{\rho(x_i)}{\rho_{um}}$ varie de 0.5 à $\frac{1}{e}$ (~ 0.368) ; on voit donc que même la forme $\rho(x) = \rho_{um} f^{\nu}$ est incapable de reproduire une valeur du rapport $\rho(x_i)/\rho_{um} = 0.35$. Des valeurs plus grandes de ce rapport correspondent à des valeurs de ν néanmoins très élevées : par exemple $\nu = 5.32$ pour un rapport $\rho(x_i)/\rho_{um} = 0.40$ et $\nu = 3.12$ pour $\rho(x_i)/\rho_{um} = 0.42$. Les valeurs sont comparables à celles obtenues précédemment par une méthode où l'on analysait l'ensemble de la surface et non seulement une propriété ponctuelle.

Pour résumer la présente discussion, on peut remarquer que la dissymétrie de la surface nucléaire est liée à ce que les deux régions sont gouvernées par des propriétés distinctes de l'interaction. La partie interne est gouvernée essentiellement par le paramètre a, i.e. la compressibilité et les paramètres déterminant l'énergie de surface -notamment le paramètre d. L'extérieur est déterminé principalement par l'énergie de Fermi du système, égale dans le milieu semi-infini à l'énergie moyenne.

Des distributions dissymétriques ont déjà été discutées, notamment par Wilets (56) et Bethe (68).

Wilets utilise comme information expérimentale l'épaisseur et l'énergie de surface et introduit une densité d'énergie potentielle de volume de la forme

$$H(\rho) = \rho \lambda_{nm} \left(1 - 2 \left(\frac{\rho}{\rho_{nm}} \right)^{\frac{1}{\nu}} + \left(\frac{\rho}{\rho_{nm}} \right)^{\frac{2}{\nu}} \right) \qquad (21)$$

Un terme d'homogénéité calqué sur la correction de Weizäcker

$$\frac{\hbar^2}{2m} \beta \frac{(\nabla \rho)^2}{\rho} \qquad (22)$$

où β est un paramètre à déterminer, est ajouté à $H(\rho)$, et la valeur $\beta = \frac{1}{10.5}$ donne le meilleur accord (voisine de celle de la fonctionnelle MTF). L. Wilets trouve une valeur $\nu = 1.28$ (correspondant à une valeur de l'incompressibilité $K = 175$ MeV et $\rho_{nm}^2 H''' = 46$ MeV), soit une valeur de ν à peu près 2 fois plus petite que celles obtenues dans le présent travail. Cependant, à proprement parler, le terme $\frac{\hbar^2}{2m} \beta \frac{(\nabla \rho)^2}{\rho}$ n'est pas considéré dans l'article de Wilets comme un terme purement cinétique, mais plutôt comme un terme reproduisant tous les effets d'inhomogénéité -potentiel plus cinétique. Le coefficient d est donc nul, d'où également b = 0 (cf. éq. 6.b), conduisant à une valeur ν proche de 1 (cf. éq.(9)). Dans les fonctionnelles plus récentes, le coefficient des termes $(\nabla \rho)^2$ de la partie potentielle ne diverge pas à faible densité (il est constant) et les valeurs du coefficient b correspondantes sont voisines de 1 ; par conséquent les asymétries de la surface sont plus grandes.

Bethe obtient une forme plus asymétrique que celle de Wilets :

$$\rho = \rho_{nm} \left(1 - \exp \frac{x}{a} \right)^2 \qquad x < 0$$

$$= 0 \qquad x > 0$$

utilisant, comme densité d'énergie, une partie potentielle comprenant des termes d'inhomogénéité et une partie cinétique de Thomas Fermi ($\beta = \gamma = 0$). Notons qu'avec une valeur $\beta = 0$ il n'y a pas de solution à queue exponentiellement décroissante. En ce sens les paramètres β et d ne jouent pas

des rôles symétriques dans la détermination du profil de la surface, même si le terme $\frac{(\nabla\rho)^2}{\rho}$ de Wilets donne une contribution à l'énergie comparable à celle du terme $(\nabla\rho)^2$ de Bethe . Néanmoins l'approximation de Thomas-Fermi pure est bonne dans la plus grande partie de la surface ($\rho(r)/\rho_{..} \gtrsim 0.17$) et nous obtenons, avec l'approximation ITF, et l'interaction SkM, dont les propriétés sont proches de celles de la fonctionnelle utilisée par Bethe, une description du profil nucléaire comparable à celui qu'il obtient.

Tout en rédigeant cette thèse, nous nous sommes aperçus lors d'une relecture attentive de la réf.[CJB-77] que les auteurs avaient effectué un calcul variationnel restreint (correspondant à la résolution self-consistante exacte présentée dans la réf.[2]) en paramétrisant les densités par des distributions de forme :

$$\rho(r) = \rho_0 \frac{1 + \rho_1 \exp(-r^2/\beta^2)}{\left(1 + \exp\frac{r-R}{t}\right)^{\alpha}}$$

(Le terme en ρ_1 autorise une dépression centrale due à l'interaction coulombienne). Ces auteurs trouvent que les résultats concernant l'énergie totale sont stables dans la région $3 \leq \alpha \leq 7$ pour des interactions de Skyrme et choisissent la valeur $\alpha = 3$. Cette valeur se compare bien à la valeur $\nu = 3.61$ trouvée plus haut pour l'interaction S-III. Nous verrons cependant que dans le cas $N \neq Z$ il faut considérer des valeurs de ν différentes pour les neutrons et les protons (cf. Sect. II.1.3) et que ceci a son importance dans le calcul des diffusivités et de l'énergie de symétrie de surface.

II.1.2 - Tension superficielle et énergie de surface

Une expression simple de l'énergie de surface peut être obtenue de façon élégante par la méthode suivante [Wi-58].

L'énergie de surface est définie par la différence entre l'énergie totale et l'énergie de volume, i.e. l'énergie qu'aurait le système si toutes les particules possédaient l'énergie moyenne du milieu infini à la saturation : l'expression qui en découle pour la tension superficielle est donc :

$$\Sigma = \int_{-\infty}^{+\infty} \left(H(\rho) + \frac{\hbar^2}{2m} \beta \frac{\rho'^2}{\rho} + d\rho'^2 + V_{s_0} \rho \rho'^2 - \lambda_{\infty m} \rho \right) dx \qquad (23)$$

l'équation (3) indique que les contributions des termes de volume et de surface sont égales, et l'on obtient :

$$\Sigma = 2 \int_{-\infty}^{+\infty} \left(H(\rho) - \lambda_{\infty m} \rho \right) dx = 2 \int_{-\infty}^{+\infty} \left(\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\beta}{\rho} + d + V_{s_0} \rho \right) \rho'^2 dx \qquad (24)$$

Comme la fonction $\rho(x)$ est monotone décroissante, on peut prendre comme variable d'intégration la densité elle-même, en se servant de l'équation (5). D'où

$$\varepsilon_s = 4\pi r_0^2 \Sigma$$

$$\Sigma = 2 \int_0^{\rho_{\infty m}} \sqrt{\frac{\hbar^2}{2m} \beta + d\rho + V_{s_0} \rho^2} \sqrt{\frac{H(\rho)}{\rho} - \lambda_{\infty m}} \, d\rho \qquad (25)$$

Cette équation permet évidemment un calcul très précis de l'énergie et de la tension de surface puisqu'il n'est même pas besoin de déterminer la densité $\rho(x)$ pour calculer Σ .

Si l'on utilise l'équation (7) pour $H(\rho)/\rho$, on obtient alors, pour le coefficient ε_s de la formule de masse

$$\varepsilon_s = 4\pi r_0^2 \Sigma = 8\pi r_0^2 \rho_{\infty m}^{4/3} \sqrt{\frac{\hbar}{18} d} \int_0^{-1} \eta \sqrt{\left(\frac{1}{b} + \eta\right)(1 + c\eta)} \, d\eta \qquad (26.a)$$

$$r_0 = \left(\frac{3}{4\pi \rho_{\infty m}} \right)^{1/3}$$

Dans le cas où l'on néglige le terme spin-orbite, on peut, à l'approximation cubique pour $H(\rho)/\rho$, intégrer (25) analytiquement. Cependant l'expression obtenue est très compliquée et la transparence propre à une expression analytique est largement voilée. Néanmoins, on obtient une expression simple et d'une précision de $\sim$ 5 % en supposant c = 0 :

$$\Sigma = \frac{8}{45} \rho_{nm}^{3/2} \left(1 + \frac{5}{2} \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\beta}{d \rho_{nm}}\right) \sqrt{\frac{K d}{2}} \qquad (26.b)$$

On voit que Σ dépend essentiellement de la *compressibilité* K *et du paramètre* d, coefficient des termes en gradient dans l'équation (1) (outre la dépendance en ρ_{nm}).

Nous allons maintenant montrer qu'un calcul variationnel restreint, utilisant pour la densité la forme (14) en imposant la valeur de ν correspondant à chaque interaction, permet d'obtenir des expressions simples pour le paramètre de diffusivité t et pour l'énergie de surface. On verra ainsi le lien -caché dans l'équation (26.b)- entre ces deux grandeurs.

De tels calculs variationnels restreints, mais avec $\nu = 1$ ont été et sont largement utilisés, notamment par Brack et al. dans divers travaux d'analyse de propriétés de la goutte liquide, par Blaizot et Grammaticos [BG-81] dans l'étude de la compressibilité de surface, et par Campi et Stringari [CS-80] dans l'étude de l'épaisseur et de l'énergie de surface. On a vu que le profil de la surface n'est pas bien reproduit par une telle distribution et certaines propriétés détaillées de la surface nucléaire sont sensibles à cette contrainte de symétrie introduite (cf. section II.1.3).

L'étude qui suit diffère de celle de Campi-Stringari par les deux points suivants :

i) on inclut l'interaction spin-orbite, dont la contribution à l'énergie de surface est de l'ordre de -1.5 MeV [C -77],

ii) au lieu d'effectuer la variation de l'énergie en considérant une certaine classe de transformation de $\rho(r)$ ($\delta\rho \propto \bar{\nabla}(\bar{r}\rho')$), on utilise le développement leptodermique pour varier l'énergie totale par rapport à ρ_0 , R et t,

iii) on utilise des distributions de (Fermi)$^\nu$ pour les densités, avec ν calculé pour chaque interaction, au lieu de prendre $\nu = 1$.

On peut montrer qu'une intégrale de la forme :

$$I_{\mu\nu} = \int_0^\infty \frac{r^\mu dr}{\left(1+\exp\frac{r-R}{t}\right)^\nu} \tag{27}$$

admet le développement leptodermique (cf. ref.[7]) :

$$I_{\mu\nu} = \frac{R^\mu}{\mu+1}\left[1 + (\mu+1)\,\zeta \sum_0^\mu C_\mu^k \eta_\nu^{(k)} \zeta^k + \omega_{\mu\nu}(\zeta)\right] \tag{28}$$

où $\zeta = \frac{t}{R}$, $\omega_{\mu\nu}(\zeta) \to 0$ quand $z \to 0$ comme $e^{-\frac{1}{\zeta}}$.

Nous limitant aux propriétés de surface et aux valeurs $\mu = 2$, nous écrirons :

$$I_{2\nu} \simeq \frac{R^3}{3}\left[1 + 3\,\eta_\nu^\circ \frac{t}{R}\right] \tag{29}$$

Le coefficient η_ν° est donné par l'intégrale :

$$\eta_\nu^\circ = \int_0^\infty \left[\frac{1+e^{-u\nu}}{(1+e^{-u})^\nu} - 1\right] du \tag{30}$$

C'est une fonction universelle qui peut être tabulée.
Remarquons que, si l'on part des relations de récurrences sur les η_ν° (cf. App.B de la Réf[6]) on peut obtenir l'expression approchée à 1% suivante :

$$\eta_\nu^\circ \sim -\log\left[e^{\Sigma}(\nu-1)+1\right] \tag{30.a}$$

où Σ est la constante d'Euler $\Sigma = 0.577216$. Comme les valeurs de ν qui nous intéresseront sont relativement grandes, on peut écrire :

$$\eta_\nu^\circ \sim -\Sigma - \log\nu - \frac{1-e^{\Sigma}}{e^{\Sigma}\nu} \tag{30.b}$$

Le développement leptodermique d'un terme de la forme ρ^s s'écrit donc, en prenant pour ρ la distribution $\rho(x) = \frac{\rho_0}{\left(1+\exp\frac{r-R}{t}\right)^\nu}$

$$4\pi \int_0^\infty \rho^s r^2 dr = 4\pi \rho_0^s \frac{R^3}{3} \left[1 + 3\eta^0_{s\nu} \frac{t}{R} + 6\eta^{(1)}_{s\nu} \frac{t^2}{R^2} + \cdots \right] \qquad (31)$$

Comme $\eta_1 = 0$, dans le cas $\nu = 1$ le nombre de nucléons A est donnée par :

$$A = \frac{4}{3}\pi R^3 \rho_0 \left(1 + \pi^2 \frac{t^2}{R^2}\right) \qquad (32)$$

Il ne contient pas -dû à la symétrie de la distribution autour du point d'inflexion- de terme de surface. Le premier terme de (31) peut donc être identifiée comme le terme de volume (variant comme A) et le second -si l'on maintient ρ_0 constant- comme le terme de surface (variant comme $A^{2/3}$). Au contraire, dans le cas $\nu \neq 1$, on a $\eta_\nu \neq 0$ si bien que :

$$A = \frac{4}{3}\pi \rho_0 R^3 \left(1 + 3\eta^0_\nu \frac{t}{R} + 6\eta^1_\nu \frac{t^2}{R^2}\right) \qquad (33)$$

ou

$$R^3 \simeq r_0^3 A \left\{ 1 - 3\eta^0_\nu \frac{t}{r_0} A^{-1/3} + 6\left[(\eta^0_\nu)^2 - \eta^1_\nu\right] \frac{t^2}{r_0^2} A^{-2/3} \right\} \qquad (34)$$

et l'on voit que le terme en R^3 de (31) donne une contribution à la surface en $A^{2/3}$; on aura donc en général :

$$\int \rho^s d\vec{r} = \rho_0^{s-1} A + \frac{3t}{r_0} \rho_0^{s-1} A^{2/3} \left(\eta^0_{s\nu} - \eta^0_\nu\right) + \frac{6t^2}{r_0^2} A^{1/3} \left[\eta^1_{s\nu} - \eta^0_{s\nu}\eta^0_\nu + (\eta^0_\nu)^2 - \eta^1_\nu\right] \qquad (35)$$

(Dans un noyau fini, $\rho_0 > \rho_{um}$ et le premier terme de (35) n'est encore pas un pur terme de volume ; mais ceci est un effet indépendant de ν).

De même, on obtient aisément les développements (qui se limitent pour ce qui nous intéresse à un seul terme) des termes

d'inhomogénéité de la fonctionnelle

$$\int \frac{\rho'^2}{\rho} d\vec{r} = \frac{3 A^{2/3}}{r_0 t} \frac{\nu}{\nu+1} \tag{36}$$

$$\int \rho'^2 d\vec{r} = 3 \frac{A^{4/3}}{r_0 t} \rho_0 \frac{\nu}{2(2\nu+1)} \tag{37}$$

$$\int \rho \rho'^2 d\vec{r} = 3 \frac{A^{2/3}}{r_0 t} \rho_0^2 \frac{\nu}{3(3\nu+1)} \tag{38}$$

On utilise pour cela la relation :

$$\rho = \rho_0 f^\nu \quad \Rightarrow \quad \rho' = \rho_0 \nu f^{\nu-1} f' = \rho_0 \frac{\nu}{t} f^\nu (f-1) \tag{39}$$

et $$\int_{-\infty}^{+\infty} f^\nu (f-1)^2 dx = \frac{t}{\nu(\nu+1)}$$

L'énergie totale par particule, développée à l'ordre des termes de surface, d'un système fini N = Z, sans interaction coulombienne, prend alors la forme suivante, dans le cas d'une interaction de type Skyrme :

$$\frac{1}{A}\int \mathcal{H} d\vec{r} = \frac{E}{A} = \left(\frac{E}{A}\right)_0 + \frac{3t}{r_0} A^{-1/3} \left[\frac{3}{5} T_F \eta^\circ_{\frac{5}{3}\nu} + \frac{3}{8} t_0 \rho_0 \eta^\circ_{2\nu} + \frac{t_3}{16} \rho_0^{1+\sigma} \eta^\circ_{(2+\sigma)\nu} \right.$$

$$\left. + \frac{3}{8_0} \left[3t_1 + t_2 (5 + 4x_2) \right] \rho_0 k_F^2 \eta^\circ_{\frac{8}{3}\nu} - \left(\frac{E}{A}\right)_0 \eta^\circ_\nu \right]$$

$$+ \frac{3A^{-1/3}}{r_0 t} \left[\frac{\hbar^2}{2m} \beta \frac{\nu}{\nu+1} + d\rho_0 \frac{\nu}{2(2\nu+1)} + V_{s_0} \rho_0^2 \frac{\nu}{3(3\nu+1)} \right] \tag{40.a}$$

La condition $\frac{d}{dt}\left(\frac{E}{A}\right) = 0$ donne, à partir de l'équation (40.a) (et à limite semi-infinie où $\rho_0 = \rho_{nm}$) :

$$t^2 = \frac{\frac{\hbar^2}{2m} \beta \frac{\nu}{\nu+1} + d\rho_{nm} \frac{\nu}{2(2\nu+1)} + V_{s_0} \rho_{nm}^2 \frac{\nu}{3(3\nu+1)}}{\frac{3}{5} T_F \eta^\circ_{\frac{5}{3}\nu} + \frac{3}{8} t_0 \rho_{nm} \eta^\circ_{2\nu} + \frac{t_3}{16} \rho_{nm}^{1+\sigma} \eta^\circ_{(2+\sigma)\nu} + \frac{3}{8_0} \left[3t_1 + t_2 (5+4x_2) \right] \rho_{nm} k_F^2 \eta^\circ_{\frac{8}{3}\nu} - \left(\frac{E}{A}\right)_{nm} \eta^\circ_\nu} \tag{40.b}$$

Si l'on utilise la forme approchée (7), qui s'écrit aussi :

$$H(\rho) = \rho \lambda_{nm} + \frac{K}{18} \rho \left[1-c + \frac{\rho}{\rho_{nm}}(3c-2) + \left(\frac{\rho}{\rho_{nm}}\right)^2 (1-3c) + \left(\frac{\rho}{\rho_{nm}}\right)^3 c \right] \qquad (41.a)$$

on obtient :

$$\frac{1}{A}\int \mathcal{H} d\vec{r}' = \frac{E}{A} = \left(\frac{E}{A}\right)_0 + \frac{3t}{r_0} A^{-1/3} \left[\eta^\circ_\nu \left[\lambda_{nm} - \left(\frac{E}{A}\right)_0 \right] + \frac{K}{18} \left(\eta^\circ_\nu (1-c) - \eta^\circ_{2\nu} (2-3c) + \eta^\circ_{3\nu} (1-3c) + \eta^\circ_{4\nu} c \right) \right] + \frac{3 A^{-1/3}}{r_0 t} \left[\frac{\hbar^2}{2m} \beta \frac{\nu}{\nu+1} + d\rho_0 \frac{\nu}{2(2\nu+1)} + V_{s0} \rho_0^2 \frac{\nu}{3(3\nu+1)} \right] \qquad (41.b)$$

t s'écrit alors :

$$t = \left[\frac{18}{K} \frac{\frac{\hbar^2}{2m} \beta \frac{\nu}{\nu+1} + d\rho_{nm} \frac{\nu}{2(2\nu+1)} + V_{s0} \rho_{nm}^2 \frac{\nu}{3(3\nu+1)}}{\eta^\circ_\nu - 2\eta^\circ_{2\nu} + \eta^\circ_{3\nu} + c\left(-\eta^\circ_\nu + 3\eta^\circ_{2\nu} - 3\eta^\circ_{3\nu} + \eta^\circ_{4\nu}\right)} \right]^{1/2} \qquad (41.c)$$

En utilisant l'expression (30.b) pour η_ν , on obtient :

$$t = \left[\frac{18}{K} \frac{\frac{\hbar}{2m}\beta\frac{\nu}{\nu+1} + d\rho_{nm}\frac{\nu}{2(2\nu+1)} + V_{s_0}\rho_{nm}^2\frac{\nu}{3(3\nu+1)}}{\ln\frac{t}{3} + \frac{0.1096}{\nu} + c\left[\ln\frac{t}{32} - \frac{0.1096}{\nu}\right]} \right]^{1/2} \qquad \text{(II-42)}$$

On peut également avoir à la même approximation une expression pour la tension superficielle, à partir de la seconde forme de l'équation (24). On obtient immédiatement :

$$\Sigma = 2\frac{\rho_{nm}}{t}\left[\frac{\hbar^2}{2m}\beta\frac{\nu}{\nu+1} + d\rho_{nm}\frac{\nu}{2(2\nu+1)} + V_{s_0}\rho_{nm}^2\frac{\nu}{3(3\nu+1)}\right] \qquad \text{(II-43)}$$

Dans la mesure où la diffusivité t ne correspond pas à la distance séparant les points où la densité a chuté de 10 % et de 90 %, il est utile de calculer la diffusivité *effective* t_{eff} d'une distribution de $(\text{Fermi})^\nu$ comme la diffusivité du $(\text{Fermi})^1$ ayant la même épaisseur de surface. On considère donc les points x_i et x_e tels que :

$$\frac{1}{\left(1+\exp\frac{x_i}{t}\right)^\nu} = \frac{9}{10}$$

$$\frac{1}{\left(1+\exp\frac{x_e}{t}\right)^\nu} = \frac{1}{10}$$

On trouve alors :

$$t_{eff} = \frac{x_e - x_i}{4\ln 3} = \frac{t}{4\ln 3}\ln\frac{(10)^{\frac{1}{\nu}}-1}{\left(\frac{10}{9}\right)^{\frac{1}{\nu}}-1} \qquad \text{(II-44)}$$

Le tableau ci-dessous compare les valeurs de t_{eff}, Σ et ε_s calculés à partir des équations (9a) et (25) (1ère ligne), (40b) et (43) (2ème ligne) et (41.c) et (43) (3ème ligne). On voit que le calcul variationnel restreint permet de calculer Σ (et ε_s) avec une précision inférieure au % quand on utilise la fonctionnelle de Skyrme exacte et avec une précision de

	SkM			S-III		
	t_{eff}	Σ	ε_s	t_{eff}	Σ	ε_s
à partir de (9.a) et (25)	(0.59)	0.962	15.76	(0.45)	0.951	16.65
(40.b) et (43)	0.50 (0.55)	0.961	15.75	0.41	0.948	16.60
(41.c) et (43)	0.51 (0.56)	0.939	15.38	0.40	0.963	16.85
(41.c) et (43) mais $\nu = 1$	0.45	0.980	16.06	0.36	0.998	17.47

$\sim$ 2 % si on utilise le développement cubique de $H(\rho)/\rho$. La valeur de ν ici utilisée est celle donnée par l'équation (9b). Cependant l'accord est encore satisfaisant pour Σ (2 à 5 %) si on utilise la valeur $\nu = 1$ (cf. dernière ligne du tableau).

En ce qui concerne les diffusivités, les valeurs données entre parenthèses correspondent à des calculs où l'on néglige l'interaction spin-orbite ; on peut ainsi comparer à la solution analytique (9a) qui est obtenue moyennant cette hypothèse. L'effet de l'interaction spin-orbite est de diminuer l'épaisseur de surface (de 10 % environ). On voit que le calcul variationnel restreint utilisant un $(\text{Fermi})^{\nu}$ tend à diminuer légèrement l'épaisseur de surface ($\sim$ 10 %), ce qui donne d'ailleurs un meilleur accord global (cf. II-2) avec la courbe exacte que celui obtenu sur la fig.(II-1). Hormis la région de l'épaule interne de la densité, les deux profils sont confondus dans l'épaisseur du trait.

On donne également pour comparaison les courbes obtenues par une calcul variationnel restreint utilisant un $(\text{Fermi})^1$ (également sans interaction spin-orbite).

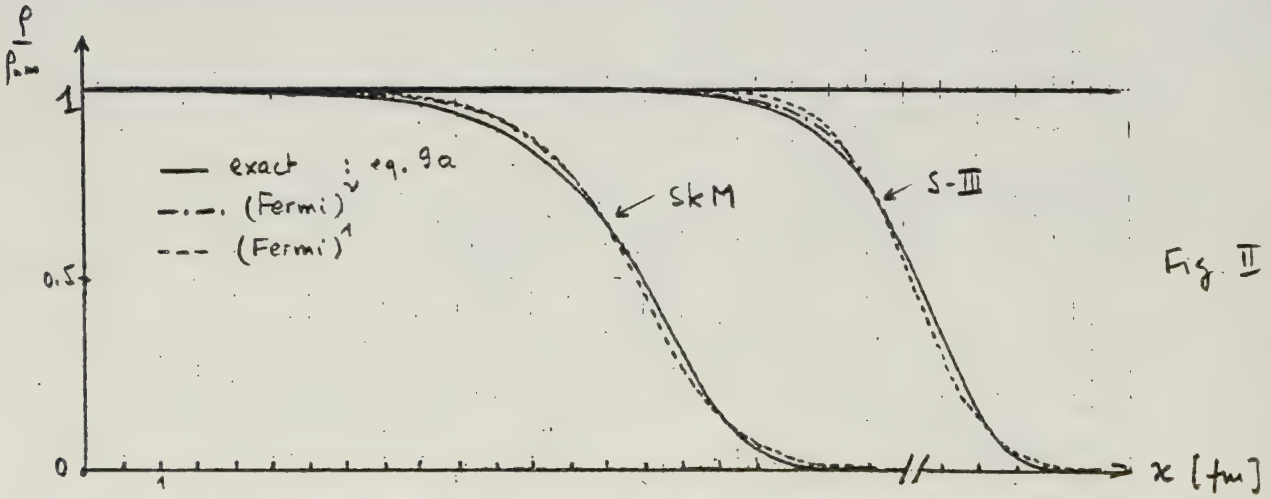


Fig. II.2

L'examen de la dernière ligne du tableau précédent montre que la diffusivité obtenue en contraignant la distribution à un $(\text{Fermi})^1$ (l'interaction spin-orbite est incluse dans le calcul) est *10% plus petite* qu'en prenant la valeur ν donnée par l'équation (9b), i.e. *20% plus petite* que la valeur exacte. Nous verrons à la fin du présent chapitre (section II.3) que ceci a des conséquences sur la détermination, à partir des données expérimentales, de la densité de saturation de la matière nucléaire.

On montre enfin dans ce tableau ci-dessous la comparaison des résultats obtenues avec les diverses fonctionnelles : ITF, MTF et C-S.

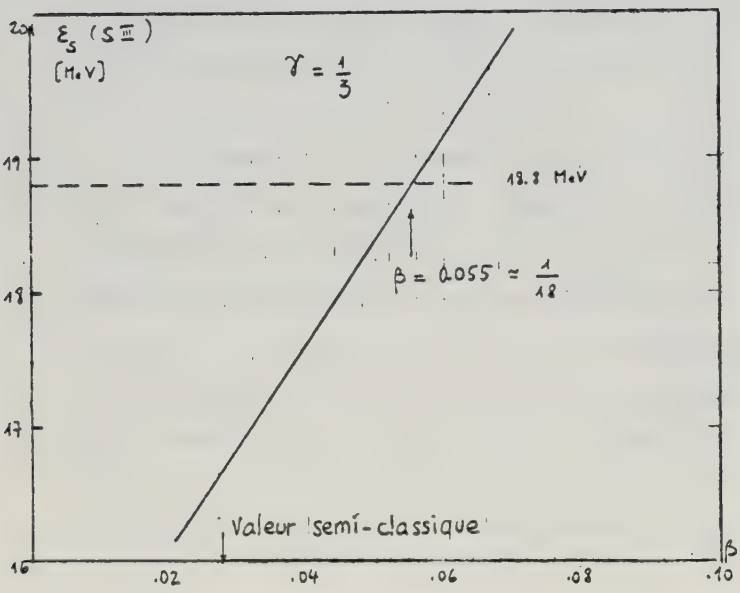
	SkM			S-III		
	ITF	MTF	C-S	ITF	MTF	C-S
t_{eff}	0.50	0.68	0.62	0.41	0.57	0.51
$\Sigma_{eq}(25)$	0.962	1.365	1.239	0.951	1.390	1.249
$\varepsilon_{s\,eq}(25)$	15.76	22.34	20.30	16.65	24.3	21.86

Les écarts importants dans les valeurs de Σ reflètent en partie les écarts importants dans l'évaluation des diffusivités. On trouve dans la réf.[CP-78] la valeur ε_s = 18.8 MeV pour S-III obtenue par un calcul HF dans le milieu semi-infini. Cette valeur est intermédiaire entre la valeur ITF et la valeur CS. La valeur MTF est encore supérieure, mais il faut noter que la fonctionnelle MTF contient une dépendance explicite en A qui contribue à la détermination de ε_s . Cette dépendance n'est pas considérée dans le tableau ci-dessus si bien que les chiffres de la colonne MTF ne sont indicatifs -comme ceux de la colonne CS- que de l'influence du paramètre β sur le calcul de ε_s .

Notons qu'on trouve dans la réf.[CJB-77] la valeur ε_s = 18.56 MeV pour S-III, obtenue par ajustement des coefficients d'une formule de masse sur les énergies calculées d'une vingtaine de noyaux dans la région $40 \leqslant A \leqslant 400$. L'écart de 2 MeV par rapport au *résultat exact* trouvé ici (ε_s = 16.65) est important : il est attribuable au fait qu'une correction est apportée, dans la réf.[CJB-77] , au calcul variationnel restreint des énergies des fondamentaux utilisant la fonctionnelle ETF au second ordre en $\hbar$, qui tient compte des termes d'ordre supérieur en $\hbar$.

Il semble que l'utilisation de la fonctionnelle ETF à l'ordre 4 en $\hbar$ donne un meilleur accord avec le calcul HF de ε_s que celui obtenu dans le présent travail [HGB-81] . Nous avons préféré ici conserver la simplicité de la fonctionnelle ITF -et nous souvenir qu'elle sous-estime ε_s .

Remarquons alors que l'étude précédente fournit un moyen de construire une fonctionnelle effective utilisable dans les noyaux finis, plus simple cependant que la fonctionnelle MTF (i.e. sans dépendance explicite en nombre de nucléons A) : on a tracé sur la figure suivante, pour l'interaction S-III, l'énergie de surface obtenue en fixant $\gamma = 1/3$ et en faisant varier β . On voit que la valeur HF, $\varepsilon_s = 18.8$ MeV, est obtenue pour $\beta \simeq 0.055 \simeq 1/18$, soit environ deux fois la valeur semi-classique $\beta = 1/36$.



On vérifie sur le tableau ci-dessous que l'accord avec les calculs HF de l'énergie de surface pour l'ensemble des forces de Skyrme est alors excellent, si l'on tient compte que les valeurs HF calculées pour les forces ayant une masse effective faible (notamment S-IV et S-V) ont une incertitude d'ordre numérique de l'ordre de 1 à 2 MeV.

On voit également que l'interaction SkM, qui n'a pas été ajustée sur les masses nucléaires, possède une énergie de surface trop faible : on sait que les formules de masse récentes donnent une valeur de 20 à 21 MeV. Nous reviendrons plus loin sur cette question (Sect. II.1.3).

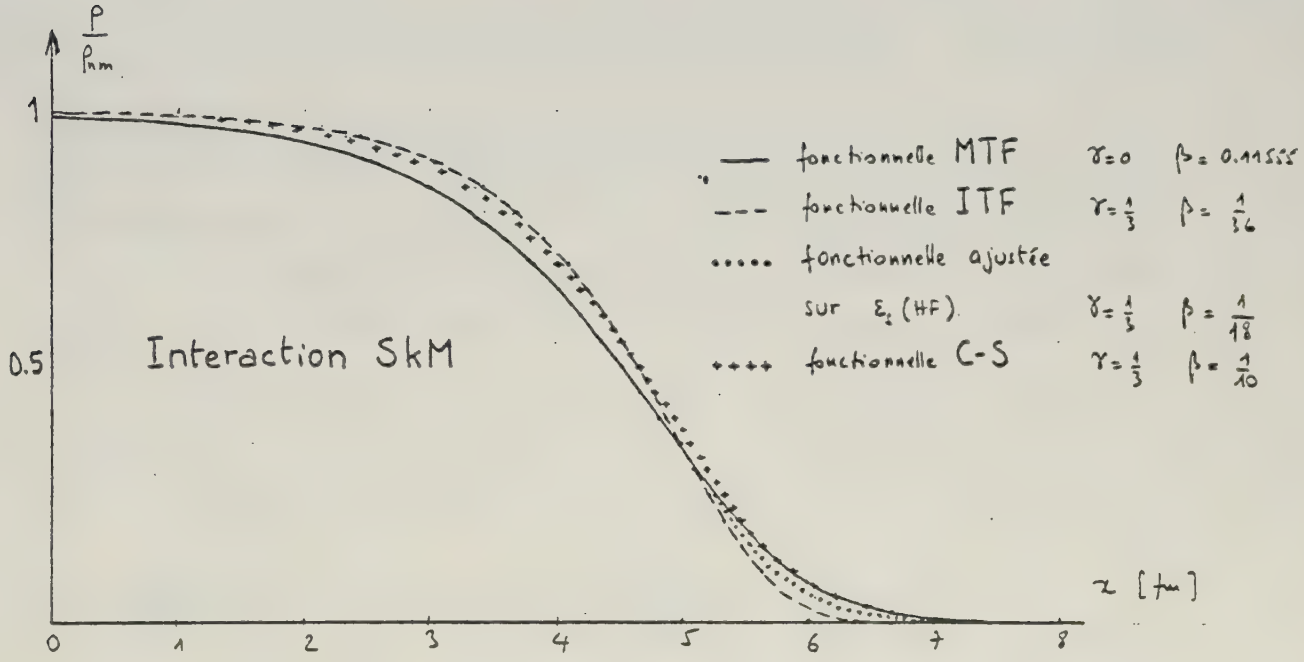
	S-II	S-III	S-IV	S-V	S-VI	SkM
ε_s [FCP-81]	19.8	18.8	19.6	19.8	18.3	
ε_s eq. 43 $\gamma=\frac{1}{3}$, $\beta=\frac{1}{18}$	20.2	18.8	20.4	21.5	18.1	17.7

La figure ci-dessous montre la comparaison du profil des densités dans le milieu semi-infini (cf. eq.(9.a)) pour l'interaction SkM. On peut noter les différents points suivants :

i) le coefficient γ influe sur la partie interne de la surface (comparaison des courbes MTF et CS).

ii) le coefficient β ne joue que sur la partie externe de la surface (comparaison des courbes ITF et en pointillé).

iii) en ajustant β de façon à reproduire l'énergie de surface HF, on améliore d'environ 10 % l'épaisseur de surface donnée par l'approximation ITF ; le désaccord avec la description HF du profil de la surface n'est donc plus que d'environ 10 à 15 %.



II.1.3 - Cas N ≠ Z

Nous allons maintenant étendre la méthode au cas N≠Z, où il n'est pas possible d'obtenir des expressions analytiques simples pour les différentes grandeurs utiles, notamment l'énergie de symétrie de surface ; la méthode présentée ici fournit néanmoins des expressions approchées satisfaisantes.

L'énergie totale s'écrit, dans le cas $\rho_n \neq \rho_p$ (cf eq. (I-19)) :

$$E = \int \mathcal{H}(\rho_n, \rho_p)\, d\vec{r} = \int \Big[H(\rho_n, \rho_p) + \frac{\hbar^2}{2m} \beta \Big(\frac{\nabla \rho_n^2}{\rho_n} + \frac{\nabla \rho_p^2}{\rho_p} \Big) + d_n (\nabla \rho_n)^2 + \nabla \rho_p)^2$$

$$+ d_1 \nabla \rho_n \nabla \rho_p + d_2 \Big(\rho_p \frac{\nabla \rho_n^2}{\rho_n} + \rho_n \frac{\nabla \rho_p^2}{\rho_p} \Big) + V_{so}^n \rho_n \nabla \rho_n^2 + V_{so}^p \rho_p (\nabla \rho_p)^2 \qquad (44)$$

avec $V_{so}^q = V_{so} \frac{m^*}{m} q$ et $\frac{m^*}{m} q \simeq 1 - 5\rho - 4\rho_q$

et l'équilibre du système à 2 composantes s'exprime dans 2 équations d'Euler couplées (pour simplifier on fera l'approximation, dans le terme spin-orbite, que la masse effective m_q^* ne dépend pas de r.

$$\lambda_n = H_n + \frac{\hbar^2}{2m} \beta \Big[\frac{\rho_n'^2}{\rho_n} - 2 \frac{\Delta \rho_n}{\rho_n} \Big] - 2 d_n \Delta \rho_n - d_1 \Delta \rho_p + d_3 \rho_p \Big(\frac{\rho_n'}{\rho_n} - \frac{\rho_p'}{\rho_p} \Big)^2 - 2 d_3 \rho_p \frac{\Delta \rho_n}{\rho_n} - V_{so}^n \Big[\rho_n'^2 + 2 \rho_n \Delta \rho_n \Big] \qquad (45\text{-a})$$

$$\text{id}^\circ \quad (n \leftrightarrow p) \qquad (45\text{-b})$$

où λ_n et λ_p sont les multiplicateurs de Lagrange correspondant aux contraintes de normalisation des distributions ρ_n et ρ_p, et $H_n = \frac{\partial H_n}{\partial \rho_n}$

A la limite semi-infinie, $\Delta \rho_q = \rho_q''$ (q = n,p), et le comportement des densités, *à l'intérieur*, peut être approché en développant H_n et H_p au voisinage de l'équilibre du milieu infini asymétrique :

$$\rho_n = \rho_n^\circ + \delta\rho_n$$

$$\rho_p = \rho_p^\circ + \delta\rho_p \qquad (46)$$

En posant $H_{qq} = \frac{\partial^2 H}{\partial \rho_q^2}$ et $H_{np} = \frac{\partial^2 H}{\partial \rho_n \partial \rho_p}$,

et en ne conservant que les termes linéaires en $\delta\rho_q$, il vient :

$$A_{nn} (\delta\rho_n)'' + A_{np} (\delta\rho_p)'' = H_{nn} \delta\rho_n + H_{np} \delta\rho_p \qquad (47.a)$$

$$A_{np} (\delta\rho_n)'' + A_{pp} (\delta\rho_p)'' = H_{np} \delta\rho_n + H_{pp} \delta\rho_p \qquad (47.b)$$

où

$$A_{nn} = \frac{2}{\rho_n^\circ}\left(\frac{\hbar^2}{2m}\rho + d_3\,\rho_p^\circ\right) + 2d_1 + 2V_{so}^n\,\rho_n^\circ \qquad (48.a)$$

$$A_{np} = d_2 \qquad (48.b)$$

A_{pn} et A_{pp} obtenues en échangeant n et p.

On pose :

$$D(A) = A_{nn}\,A_{pp} - (A_{np})^2 \qquad (49)$$

et

$$\begin{aligned} a_{nn} &= \frac{1}{D(A)}\left(H_{nn}\,A_{pp} - H_{np}\,A_{pn}\right) \\ a_{np} &= \frac{1}{D(A)}\left(H_{np}\,A_{pp} - H_{pp}\,A_{np}\right) \\ a_{pn} &= \frac{1}{D(A)}\left(H_{np}\,A_{nn} - H_{nn}\,A_{np}\right) \neq a_{np} \quad (\text{car } A_{nn} \neq A_{pp}) \\ a_{pp} &= \frac{1}{D(A)}\left(H_{pp}\,A_{nn} - H_{np}\,A_{np}\right) \end{aligned} \qquad (50)$$

d'où

$$(\delta\rho_n)'' = a_{nn}\,\delta\rho_n + a_{np}\,\delta\rho_p \qquad (51.a)$$

$$(\delta\rho_p)'' = a_{pn}\,\delta\rho_n + a_{pp}\,\delta\rho_p \qquad (51.b)$$

Les valeurs propres de ce système s'écrivent :

$$\gamma = \frac{1}{2}\left[a_{nn} + a_{pp} \pm \sqrt{(a_{nn}-a_{pp})^2 + 4\,a_{pn}\,a_{np}}\;\right] \qquad (52)$$

Pour les faibles asymétries, la matrice des (a_{pq}) est "presque" symétrique.

Par conséquent, si $a_{np} > 0$, à la plus petite racine γ_0 correspond un vecteur propre "presque" antisymétrique et à la plus grande $\gamma_1 > 0$, un vecteur propre "presque" symétrique. D'où les solutions

$$\delta\rho_n - (1+\varepsilon)\,\delta\rho_p = \mu_0^+ e^{\sqrt{\gamma_0}\,x} + \mu_0^- e^{-\sqrt{\gamma_0}\,x} \qquad (53.a)$$

$$\delta\rho_n + (1+\varepsilon')\,\delta\rho_p = \mu_1 e^{\sqrt{\gamma_1}\,x} \qquad (53.b)$$

(en plaçant le volume dans la région $x < 0$).

Si $\gamma_0 < 0$ la solution (10.a) est oscillante et donc nécessairement $\mu_0^+ = \mu_0^- = 0$. D'où le rapport

$$\frac{\delta\rho_n}{\delta\rho_p} = 1+\varepsilon = \frac{a_{nn}-\gamma_0}{a_{np}} = \frac{1}{2a_{np}}\left[a_{nn}-a_{pp}+\sqrt{(a_{nn}-a_{pp})^2+4a_{pn}a_{np}}\right] \qquad (54)$$

Si $\gamma_0 > 0$, il faut prendre $\mu_0^- = 0$ (puisqu'on a choisi de placer le volume à gauche). On a alors :

$$\delta\rho_n = \frac{1+\varepsilon'}{2+\varepsilon+\varepsilon'}\,\mu_0^+ e^{\sqrt{\gamma_0}\,x} + \frac{1+\varepsilon}{2+\varepsilon+\varepsilon'}\,\mu_1 e^{\sqrt{\gamma_1}\,x} \qquad (55.a)$$

$$\delta\rho_p = -\frac{1}{2+\varepsilon+\varepsilon'}\,\mu_0^+ e^{\sqrt{\gamma_0}\,x} + \frac{1}{2+\varepsilon+\varepsilon'}\,\mu_1 e^{\sqrt{\gamma_1}\,x} \qquad (55.b)$$

Loin à l'extérieur $e^{\sqrt{\gamma_1}\,x} \ll e^{\sqrt{\gamma_0}\,x}$ et si $\mu_0^+ \neq 0$ on obtient $\delta\rho_n$ et $\delta\rho_p$ de signes opposés. Comme on cherche la solution $\delta\rho_n$ et $\delta\rho_p$ asymptotiquement négatifs, il faut choisir

$$\mu_0^+ = 0 \quad \Rightarrow \quad \frac{\delta\rho_n}{\delta\rho_p} = 1+\varepsilon$$

et $\delta\rho_n$ et $\delta\rho_p$ varient alors exponentiellement comme $e^{\sqrt{\gamma_1}\,x}$.

Dans les deux cas, c'est donc la plus grande des valeurs propres qui gouverne l'évolution des densités à l'intérieur, et le rapport $\frac{\delta\rho_n}{\delta\rho_p}$ est toujours donné par l'équation (54).

$$\gamma_1 = \frac{1}{2}\left[a_{nn} + a_{pp} + \sqrt{(a_{nn}-a_{pp})^2 + 4a_{np}a_{pn}} \right] \qquad (56)$$

Dans le cas où $a_{np} < 0$, il faut évidemment échanger les rôles de γ_0 et γ_1 car à la racine la plus petite correspond alors une solution symétrique.

L'extérieur peut être approché, comme dans le cas N = Z, par le comportement asymptotique des solutions du système (2.a) et (2.b). On obtient clairement :

$$\rho_n \sim \exp\left[-\sqrt{-\frac{2m}{\hbar^2}\frac{\lambda_n}{\beta}}\, x \right] \qquad (57.a)$$

$$\rho_p \sim \exp\left[-\sqrt{-\frac{2m}{\hbar^2}\frac{\lambda_p}{\beta}}\, x \right] \qquad (57.b)$$

où

$$\lambda_n = \left.\frac{\partial E}{\partial N}\right|_{A\to\infty} = \varepsilon_v + \varepsilon_\delta^v\, I(2-I) \qquad (58.a)$$

$$\lambda_p = \left.\frac{\partial E}{\partial Z}\right|_{A\to\infty} = \varepsilon_v - \varepsilon_\delta^v\, I(2+I) \qquad (58.b)$$

et où ε_δ^v désigne l'énergie de symétrie de volume à la saturation de la matière nucléaire symétrique.

On voit donc que *la diffusivité interne est la même pour les protons et les neutrons* :

$$t_{int} = t = \frac{1}{\sqrt{\gamma_1}} \tag{59}$$

les diffusivités externes peuvent être approchées par :

$$t^n_{ext} = \sqrt{-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\beta}{\lambda_n}} \tag{60.a}$$

$$t^p_{ext} = \sqrt{-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\beta}{\lambda_p}} \tag{60.b}$$

D'où, pour les densités protons et neutrons :

$$\rho_n = \frac{\rho_n^0}{\left(1+\exp\frac{x-x_0}{t}\right)^{\nu_n}} \tag{61.a}$$

$$\rho_p = \frac{\rho_p^0}{\left(1+\exp\frac{x}{t}\right)^{\nu_p}} \tag{61.b}$$

avec

$$\nu_n = \frac{t}{t^n_{ext}} \tag{62.a}$$

$$\nu_p = \frac{t}{t^p_{ext}} \tag{62.b}$$

et

$$\rho_n^0 = \frac{1}{2}\rho_{nm}\left(1 - \frac{3L}{K}I^2 + I\right) \tag{63.a}$$

$$\rho_r^\circ = \frac{1}{2}\rho_{nm}\left(1 - \frac{3L}{K} I' - I\right) \qquad (63.b)$$

$$I = \frac{N-Z}{A} \qquad (64)$$

$$L = 3\rho_{nm}\frac{\partial \varepsilon_d^v}{\partial \rho_{nm}} \qquad (65)$$

La présence du terme L dans (20) a pour origine le changement de la densité (totale) de saturation avec l'asymétrie neutron-proton (cf. l'Appendix B de la réf.[1]).

La constante χ_o dans (17.a) est déterminée par comparaison avec l'équation (54). En effet, à l'intérieur (61.a) et (61.b) se comportent comme :

$$\rho_n \simeq \rho_n^\circ \left[1 - \nu_n e^{-\frac{\chi_o}{t}} e^{\frac{\chi}{t}}\right] \qquad (66.a)$$

$$\rho_r \simeq \rho_r^\circ \left[1 - \nu_p e^{\frac{\chi}{t}}\right] \qquad (66.b)$$

D'où, par comparaison avec (54) :

$$\frac{\partial \rho_n}{\partial \rho_r} = 1 + \varepsilon = \frac{\nu_n}{\nu_r}\frac{\rho_n^\circ}{\rho_r^\circ} e^{-\frac{\chi_o}{t}}$$

soit

$$\chi_o = -t \, \mathrm{Log}\left[\frac{\nu_r}{\nu_n}\frac{\rho_r^\circ}{\rho_n^\circ}(1+\varepsilon)\right] \qquad (67)$$

Les équations (56),(60),(62),(63) et (67) déterminent alors les densités de neutrons et de protons complètement.

Plus explicitement, on a

$$H_{nn} = H_0 + H_1 I + H_2 I^2 \tag{68.a}$$

$$H_{np} = H_{00} + H_{22} I^2 \tag{68.b}$$

$$A_{nn} = A_0 + A_1 I + A_2 I^2 \tag{69.a}$$

$$A_{np} = d_2 \tag{69.b}$$

avec

$$H_0 = \frac{1}{\rho_{nm}} \left(\frac{\kappa}{g} + 2\varepsilon_\delta \right) \tag{70.a}$$

$$H_1 = \frac{4}{3\rho_{nm}} \left(L - 3\varepsilon_\delta \right) \tag{70.b}$$

$$H_2 = \frac{1}{g\rho_{nm}} \left[K_{sym} - 6L - 27 \frac{L}{\kappa} \rho^\nu H''' + 18 \varepsilon_\delta \left(1 + \frac{3L}{\kappa} - \frac{L^2}{\kappa \varepsilon_\delta} \right) \right] \tag{70.c}$$

$$H_{00} = \frac{1}{\rho_{nm}} \left(\frac{\kappa}{g} - 2\varepsilon_\delta \right) \tag{70.d}$$

$$H_{22} = \frac{1}{g\rho_{nm}} \left[K_{sym} - 6L - 27 \frac{L}{\kappa} \rho^\nu H''' + 18 \varepsilon_\delta \left(1 - \frac{3L}{\kappa} + \frac{L^2}{\kappa \varepsilon_\delta} \right) \right] \tag{70.e}$$

$$A_0 = \frac{4}{\rho_{nm}} \frac{\hbar^2}{2m} \beta + 2 (d_1 + d_3) + V_{s_0} \rho_{nm} \left[1 - \left(5 + \frac{\epsilon}{2} \right) \rho_{nm} \right] \tag{71.a}$$

$$A_1 = -\frac{4}{\rho_{nm}} \left(\frac{\hbar^2}{2m} \beta + d_3 \rho_{nm} \right) + V_{s_0} \rho_{nm} \left[1 - \rho_{nm} (5 + \epsilon) \right] \tag{71.b}$$

$$A_2 = \frac{2}{\rho_{nm}} \left(\frac{6L}{\kappa} \frac{\hbar^2}{2m} \beta + d_3 \rho_{nm} \right) + V_{s_0} \rho_{nm}^2 \left[\frac{6L}{\kappa} \left(5 + \frac{\epsilon}{2} \right) - \frac{\epsilon}{2} - \frac{3L}{\kappa} \right] \tag{71.c}$$

où ε_δ représente l'énergie de symétrie de volume et

$$K_{sym} = 9\,\rho_{nm}^2 \frac{\partial^2 \varepsilon_\delta^v}{\partial \rho_{nm}^2} \qquad (72.a)$$

$$L = 3\,\rho_{nm} \frac{\partial \varepsilon_i^v}{\partial \rho_{nm}} \qquad (72.b)$$

Avec une fonctionnelle de type Skyrme, les constantes d_1, d_2, d_3 s'écrivent :

$$d_1 = \frac{3}{32}\left[t_1(1-x_1) - t_2(1+x_2)\right] + \frac{1}{8}\left[3t_1(1+x_1) + t_2(1-x_2)\right]\left[\beta - \gamma\right] \qquad (73.a)$$

$$d_2 = \frac{1}{8}\left[3t_1\left(1+\frac{x_1}{2}\right) - t_2\left(1+\frac{x_2}{2}\right)\right] - \frac{\gamma}{2}\left[t_1\left(1+\frac{x_1}{2}\right) + t_2\left(1+\frac{x_2}{2}\right)\right] \qquad (73.b)$$

$$d_3 = \frac{1}{4}\left[t_1\left(1+\frac{x_1}{2}\right) + t_2\left(1+\frac{x_2}{2}\right)\right]\beta \qquad (73.c)$$

	SkM	S-III
H_0	533.76	659.52
H_1	-356.81	-684.48
H_2	-110.64	-14.97
H_{00}	-233.48	-115.92
H_{22}	-232.56	-43.60
A_0	122.88	167.82
A_1	-9.69	-76.82
A_2	28.08	21.42
ε_δ^v	30.75	28.16
L	49.34	9.91
K_{sym}	-148.80	-393.73
d_1	49.39	42.73
d_2	115.21	110.00
d_3	1.84	7.50

Le tableau ci-contre donne les valeurs des différentes grandeurs pour SkM et S-III.

Comme dans le cas symétrique, on peut encore obtenir, dans le cas semi-infini, une intégrale première en combinant les équations (45.a) et (45.b), on multiplie la première par ρ_n' la seconde par ρ_p' et on ajoute. On peut intégrer de $+\infty$ à r et obtenir :

$$H - \frac{\hbar^2}{2m}\beta\left(\frac{\rho_n'^2}{\rho_n} + \frac{\rho_p'^2}{\rho_p}\right) - d_1(\rho_n'^2 + \rho_p'^2) - d_2\,\rho_n'\rho_p' - d_3\left(\rho_p\frac{\rho_n'^2}{\rho_n} + \rho_n\frac{\rho_p'^2}{\rho_p}\right) \qquad (74)$$

$$-\left(V_{s_0}^n\,\rho_n\rho_n'^2 + V_{s_0}^p\,\rho_p\rho_p'^2\right) = \lambda_n\rho_n + \lambda_p\rho_p$$

Pour la tension superficielle, on a donc

$$\Sigma = 2\int_{-\infty}^{+\infty}\left\{\frac{\hbar^2}{2m}\beta\left(\frac{\rho_n'^2}{\rho_n} + \frac{\rho_p'^2}{\rho_p}\right) + d_1(\rho_n'^2+\rho_p'^2) + d_2\,\rho_n'\rho_p' + d_3\left(\rho_p\frac{\rho_n'^2}{\rho_n} + \rho_n\frac{\rho_p'^2}{\rho_p}\right) + V_{s_0}^n\rho_n\rho_n'^2 + V_{s_0}^p\rho_p\rho_p'^2\right\}dz$$

$$= \Sigma_n + \Sigma_p + \Sigma_{np} \qquad (75)$$

Les termes Σ_n et Σ_p ne posent pas de problème. Utilisant les équations (36) et (37), on a :

$$\Sigma_n = \frac{2\rho_n^\circ}{t}\left[\frac{\hbar^2}{2m}\beta\frac{\nu_n}{\nu_n+1} + \frac{\rho_n^\circ}{2}d_1\frac{\nu_n}{(2\nu_n+1)} + V_{s_0}^n\frac{\nu_n}{3(3\nu_n+1)}\right] \qquad (76.a)$$

$$\Sigma_p = 2\frac{\rho_p^\circ}{t}\left[\frac{\hbar^2}{2m}\beta\frac{\nu_p}{\nu_p+1} + \frac{\rho_p^\circ}{2}d_1\frac{\nu_p}{(2\nu_p+1)} + V_{s_0}^p\frac{\nu_p}{3(3\nu_p+1)}\right] \qquad (76.b)$$

L'évaluation de Σ_{np} est plus délicate car il s'agit de termes mixtes.

On développe alors l'équation (61.a) autour de $\alpha_1 = 0$ (petites valeurs de I).

En posant

$$f(x) = \frac{1}{1+\exp\frac{x}{t}}$$

on a donc :

$$\rho_n(x) = \rho_n^\circ \left[f(x-x_0) \right]^{\nu_n} \simeq \rho_n^\circ f^{\nu_n} \left[1 - \nu_n \frac{x_0}{t} + \nu_n \frac{x_0}{t} f \right]$$
$$\rho_n'(x) = \rho_n^\circ \frac{\nu_n}{t} f^{\nu_n} (f-1) \left[1 - \nu_n \frac{x_0}{t} + (\nu_n+1) \frac{x_0}{t} f \right] \qquad (77)$$

D'où :

$$\rho_n' \rho_p' = \rho_n^\circ \rho_p^\circ \frac{\nu_n \nu_p}{t^2} \left[1 - \nu_n \frac{x_0}{t} + (\nu_n+1) \frac{x_0}{t} f \right] f^{\nu_n+\nu_p} (f-1)^2$$
$$\rho_p \frac{\rho_n'^2}{\rho_n} = \rho_n^\circ \rho_p^\circ \frac{\nu_n^2}{t^2} \left[1 - \nu_n \frac{x_0}{t} + (\nu_n+1) \frac{x_0}{t} f \right] f^{\nu_n+\nu_p} (f-1)^2 \qquad (78)$$
$$\rho_n \frac{\rho_p'^2}{\rho_p} = \rho_n^\circ \rho_p^\circ \frac{\nu_p^2}{t^2} \left[1 - \nu_n \frac{x_0}{t} + \nu_n \frac{x_0}{t} f \right] f^{\nu_n+\nu_p} (f-1)^2$$

(on n'a pas dans ces expressions de symétrie n/p puisqu'elle a été brisée dans l'écriture des équations (61).

On pose :

$$g(\nu) = \frac{1}{\nu(\nu+1)}$$

et on intègre les équations (78). D'où :

$$\Sigma_{np}^{(1)} = 2 \int_{-\infty}^{+\infty} \rho_n' \rho_p' dx = 2 \rho_n^\circ \rho_p^\circ \frac{\nu_n \nu_p}{t} \left[\left(1 - \nu_n \frac{x_0}{t}\right) g(\nu_n+\nu_p) + (\nu_n+1) \frac{x_0}{t} g(\nu_n+\nu_p+1) \right] \qquad (79.a)$$

$$\Sigma_{np}^{(2)} = 2 \int_{-\infty}^{+\infty} \rho_p \frac{\rho_n'^2}{\rho_n} dx = 2 \rho_n^\circ \rho_p^\circ \frac{\nu_n^2}{t} \left[\left(1 - \nu_n \frac{x_0}{t}\right) g(\nu_n+\nu_p) + (\nu_n+1) \frac{x_0}{t} g(\nu_n+\nu_p+1) \right] \qquad (79.b)$$

$$\Sigma_{np}^{(3)} = 2\int_{-\infty}^{+\infty} \rho_n \frac{\rho_r'^2}{\rho_r} dx = 2\rho_n^0 \rho_r^0 \frac{v_r^2}{t}\left[(1-v_n\frac{x_0}{t})g_1(v_n+v_p) + v_n\frac{x_0}{t}g_1(v_n+v_p+1)\right] \qquad (79.c)$$

et

$$\Sigma_{np} = \Sigma_{np}^{(1)} d_2 + \left[\Sigma_{np}^{(2)} + \Sigma_{np}^{(3)}\right] d_3 \qquad (79.d)$$

La table ci-dessus montre que les propriétés de symétrie des interactions SkM et S-III sont sensiblement différentes (termes L et K_{sym} et par conséquent H_1, H_2 et H_{22}). Les différences ne tiennent pas à la valeur de $\varepsilon_\delta(\rho)$ à la *densité de saturation*, mais à plus faible densité ; L et K_{sym}, qui gouvernent la variation de $\varepsilon_\delta(\rho)$ avec la densité, sont donc les grandeurs importantes.

Le tableau suivant donne les valeurs de ε_δ^s utilisant diverses fonctionnelles d'énergie cinétique. On donne également pour comparaison les résultats de 2 calculs HF pour l'interaction S-III. On donne également, pour une comparaison plus aisée avec le modèle de Myers et Swiatecki, la valeur du coefficient de raideur Q, relié à l'énergie de symétrie de surface et aux autres grandeurs par la relation :

$$\varepsilon_\delta^s = \frac{2\varepsilon_s L}{K} - \frac{9}{4}\frac{(\varepsilon_\delta^v)^2}{Q} \qquad (80)$$

	SkM			S-III				
	ITF	MTF	CS	ITF	MTF	CS	HF [FCP-81]	[F1-75]
ε_δ^s	-42.6	-67.9	-60.0	-29.7	-50.0	-42.5	-40.44 à -33.26	-33.87
Q	42.7	27.2	30.7	58.5	34.9	41.0	43 à 52	51
$\left\lvert\frac{\varepsilon_\delta^s}{\varepsilon_\delta^v}\right\rvert$	1.4	2.2	2.0	1.1	1.8	1.5	1.25	1.21

Les valeurs HF sont, comme dans le cas de l'énergie de surace, intermédiaires entre les résultats semi-classiques obtenus avec la fonctionnelle ITF et ceux obtenus avec les fonctionnelles phénoménologiques. Si l'on utilise le couple de valeurs déterminées dans le calcul de ε_s :

$$\gamma = \frac{1}{3} \quad \text{et} \quad \beta = \frac{1}{18} ,$$

on trouve un remarquable accord avec les valeurs HF, pour l'ensemble des forces de Skyrme, ce qui confirme la validité de la présente méthode et donne confiance aux chiffres trouvés pour l'interaction SkM.

	S-II			S-III			S-IV			S-V			S-VI			SkM
	1	2	3	1	2	3	1	2	3	1	2	3	1	2	3	1
ε_δ^s	-62.2	-53.6 à -71.4	-85.4	-35.8	-33.9 à -40.4	-47.3	-69.6	-56.7 à -67.8	-104.8	-36.2	-83.4 à -102.7		-28.4	-24.5 à -26.4	-38.3	-50.0
Q	38.5	34 à 40	29	48.6	43 à 51	36	28.3	29 à 34	20	22.1	20 à 25		58.3	60 à 73	43	36.6
$\left\|\frac{\varepsilon_\delta^s}{\varepsilon_\delta^v}\right\|$	1.8	1.9	2.5	1.3	1.3	1.7	2.2	~2.0	3.3	2.9	~2.9		1.1	~0.9	1.4	1.6

1 : présent travail, avec $\gamma = 1/3$ et $\beta = 1/18$

2 : [FCP-81]

3 : [CJB-77]

(Il est probable que le désaccord constaté avec les résultats de la réf. [CJB-77] provienne d'une paramétrisation peut-être trop restrictive de la densité, utilisée par ces auteurs dans le calcul variationnel restreint des fondamentaux des noyaux sphériques).

Passant de SkM à S-III, on a augmenté le rapport $\varepsilon_\delta^s / \varepsilon_\delta^v$: il passe ainsi de 1.3 à 1.6. Il est interessant de comparer cette dernière valeur avec celles des récentes formules de masse (cf. par exemple [KNS-79]), qui donnent un domaine 1.6-1.8. L'accord, non recherché dans la construction de l'interaction SkM, est bon, mais vraisemblablement trompeur.

Il existe en effet une corrélation entre l'énergie de symétrie de volume et l'énergie de symétrie de surface telle que si l'on augmente ε_δ^v , le rapport $\left|\frac{\varepsilon_\delta^s}{\varepsilon_\delta^v}\right|$ augmente également. Or l'interaction SkM a une énergie de symétrie de volume de 30.7 MeV, comparée aux valeurs des

formules de masse, de l'ordre de 35-37 MeV.

La corrélation entre ε_δ^v et ε_δ^s peut s'analyser très simplement comme suit : la "quantité d'énergie de symétrie totale" de chaque noyau est une quantité en principe déterminée par l'étude des masses. Autrement dit, la combinaison :

$$\varepsilon_\delta^v + \varepsilon_\delta^s A^{-1/3}$$

doit être en gros la même quelle que soit l'interaction effective. Si l'on considère par exemple le noyau de Plomb, pour lequel $A^{-1/3} = 0.169$, deux interactions ayant l'une $\varepsilon_\delta^v = 30$ MeV et l'autre $\varepsilon_\delta^v = 36$ MeV auront, pour décrire à peu près de la même façon l'énergie de symétrie totale, des énergies de symétrie de surface différant de $\sim 6/0.169 \simeq 35.5$ MeV. Si donc la première a un rapport $|\varepsilon_\delta^s/\varepsilon_\delta^v| \simeq 1.6$ (voisin de celui de SkM), la seconde, avec $\varepsilon_\delta^v = 36$ MeV, aura un rapport $\simeq 2.4$.

Ceci explique d'ailleurs la grande variété de valeurs trouvées dans la littératture pour ε_δ^v . Par exemple, dans la ref.[MySw-66] on trouve $\varepsilon_\delta^v = 28.06$ MeV et $\varepsilon_\delta^s = -33.2$ MeV, alors que dans la ref.[MySw-74] on a : $\varepsilon_\delta^v = 36.8$ MeV et $\varepsilon_\delta^s = -164$ MeV! Ces dernières valeurs conduisent à un rapport $|\varepsilon_\delta^s/\varepsilon_\delta^v| \simeq 4.4$, i.e. largement supérieur à celui trouvé dans la réf.[KNS-79] et dans les calculs à partir de forces effectives (les interactions Ska et Skb de Köhler [Kö-76] font exception, car construites justement pour reproduire les valeurs des coefficients du modèle de Myers et Swiatecki). Bien que les forces de Skyrme aient, à notre avis, des valeurs trop faibles du rapport $|\varepsilon_\delta^s/\varepsilon_\delta^v|$ (cf. sect.IV-2), la valeur très élevée du modèle de la Gouttelette est dû certainement à une mauvaise estimation du paramètre de raideur Q : celui-ci n'est en effet pas déterminé par ajustement sur les masses des noyaux, mais par des calculs de Thomas Fermi dont nous verrons (cf. sect. II.2.2) qu'ils sous-estiment notablement l'épaisseur de la surface nucléaire. Nous reviendrons également sur cette question dans la sect. II.3, où l'on montrera les conséquences sur la détermination du rayon de matière nucléaire r_o, surestimé dans le modèle de la Gouttelette.

Il faut cependant remarquer que l'interaction SkM possède une énergie de surface trop faible (cf. sect. II.1.2). La correction de ce défaut aura certainement, par le mécanisme suivant, des répercussions sur l'énergie de symétrie de surface.

Des calculs récents ([GHB-80],[BQ-81]) ont montré que la barrière de fission calculée dans le ^{240}Pu, avec l'interaction SkM, était en meilleur accord avec l'expérience que celle, trop haute, trouvée avec S-III. Il semble même qu'elle soit cette fois légèrement trop basse.

L'origine de la différence doit être cherchée, comme il est suggéré dans la réf.[GHB-80] , dans les différences d'incompressibilité, et aussi dans les propriétés de symétrie des forces. L'énergie de surface effective $\tilde{\varepsilon}_s$, définie par :

$$\tilde{\varepsilon}_s = \varepsilon_s + \varepsilon_s^t I^2$$

est certainement une grandeur qui gouverne les hauteurs des barrières. Passant de S-III à SkM, $\tilde{\varepsilon}_s$ diminue pour deux raisons i) d'une part ε_s a diminué -ce qui est un défaut de la force et ii) ε_s^t , négatif, a augmenté en valeur absolue -ce qui constitue une amélioration. On conçoit alors que pour conserver une bonne description des barrières de fission tout en augmentant ε_s , il convienne d'augmenter ε_s^t . Par contrecoup du reste, ε_s^v augmentera également, ce qui ira vers un meilleur accord avec les formules de masse.

Mentionnons pour terminer un autre contexte où les propriétés de symétrie de la force jouent un rôle évident : celui de la formation de la peau de neutrons ; une analyse macroscopique à l'aide du Modèle de la Gouttelette est présenté dans la réf.[MySw-80]ainsi qu'une compilation de résultats expérimentaux et de calculs HF. Myers et Swiatecki concluent qu'une valeur du paramètre de raideur Q =24 MeV donne un meilleur accord que la valeur plus ancienne Q = 17 MeV. Une telle valeur fait passer l'énergie de symétrie de surface de -164 MeV à -110 MeV, et le rapport $|\varepsilon_s^t / \varepsilon_s^v|$ de $\sim$4.4 à $\sim$ 3. Compte tenu des incertitudes expérimentales qui pèsent sur la mesure des différences de rayons neutrons et protons il est certain que cette question verra encore de nombreux développements.

II.1.4 - Une importante remarque

L'approximation de proportionnalité entre les densités neutrons et protons est souvent utilisée. La figure suivante, où l'on a tracé les densités de matière du système semi-infini avec une asymétrie $I = \frac{N-Z}{A} = 0.2$, voisine de celle du Plomb, ainsi que l'asymétrie locale $\delta\rho(r) = [\rho_n(r) - \rho_p(r)]/\rho(r)$ montre que cette approximation est certainement mauvaise à la surface puisque $\delta\rho(r)$ tend asymptotiquement vers +1. Ceci est dû à l'existence de la peau de neutron α_0 (cf. Eqs. 61) et au fait que $\nu_n \neq \nu_p$. Il est facile et utile d'évaluer l'effet de l'approximation

$$\rho_n(r) = \frac{N}{A}\rho(r)$$
$$\rho_p(r) = \frac{Z}{A}\rho(r) \qquad (81)$$

sur le calcul de l'énergie de symétrie de surface.

Le développement en puissances de I^2 de la densité d'énergie $\mathcal{H}(\rho_n, \rho_p, \nabla\rho_n, \nabla\rho_p)$ s'écrit alors simplement, en s'arrêtant au ler ordre :

$$\mathcal{H}(\rho_n, \rho_p, \rho'_n, \rho'_p) = H_0(\rho) + I^2[\rho\,\varepsilon_s(\rho) + \epsilon\,\rho'^2] \qquad (82)$$

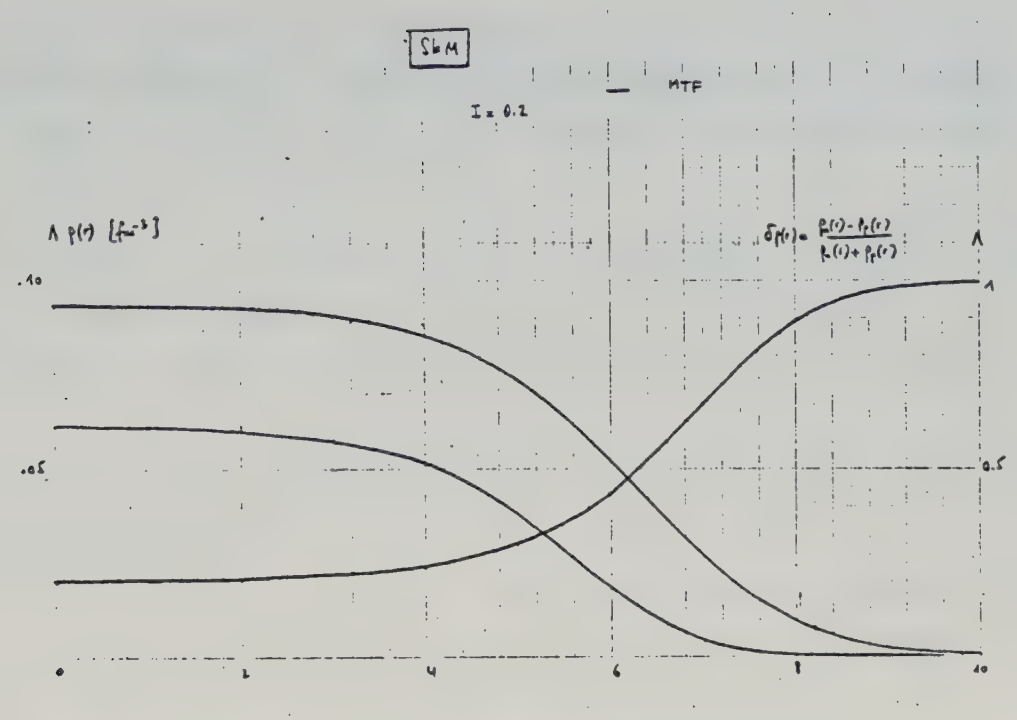


Fig. II.3

où $\mathcal{E}_\delta(\rho)$ provient de la partie de volume $H(\rho_n, \rho_p)$ et où ϵ, qui provient des termes d'inhomogénéité, s'écrit, en fonction des paramètres de Skyrme :

$$\epsilon = \frac{\beta - \gamma}{8}\left[t_2\left(\tfrac{1}{2} + x_2\right) - t_1\left(\tfrac{1}{2} + x_1\right)\right] - \frac{1}{32}\left[3t_1\left(\tfrac{1}{2} + x_1\right) + t_2\left(\tfrac{1}{2} + x_2\right)\right] \quad (83)$$

Pour $\mathcal{E}_\delta(\rho)$, il est suffisant d'utiliser le développement autour du point de saturation de la matière nucléaire symétrique (cf éq. (I-21)) :

$$\mathcal{E}_\delta(\rho) = \mathcal{E}_\delta^v + \frac{L}{3}\frac{\delta\rho}{\rho_m} + \frac{K_{sym}}{18}\left(\frac{\delta\rho}{\rho_m}\right)^2 \quad (84)$$

où $\mathcal{E}_\delta^v$ désigne l'énergie de symétrie de volume.

L'utilisation du développement leptodermique à partir de l'équation (82) donne alors immédiatement l'expression suivante pour l'énergie de symétrie de surface :

$$\varepsilon_\delta^s = \frac{t}{r_0}\left\{\eta_v^\circ\left[-1+\frac{K_{sym}}{6}\right]+\eta_{sv}^\circ\left[1-\frac{K_{sym}}{3}\right]+\eta_{3v}^\circ\frac{K_{sym}}{6}\right\}+\epsilon\,\frac{3\rho_{sym}}{r_0 t}\,\frac{\nu}{2(2\nu+1)} \quad (85)$$

En imposant $\nu=1$, l'expression se simplifie :

$$\varepsilon_\delta^s = -\frac{t}{r_0}\left(1-\frac{K_{sym}}{12}\right)+\frac{1}{2}\epsilon\,\frac{\rho_{sym}}{r_0 t} \quad (86)$$

Numériquement, on obtient les valeurs :

ε_δ^s = - 29.6 MeV pour SkM (ϵ = -6.528)

ε_δ^s = - 14.3 MeV pour SIII (ϵ = -7.674)

à partir de l'équation (86) , i.e. ν approprié à chaque force , et :

ε_δ^s = - 28.4 MeV pour SkM

ε_δ^s = - 14.5 MeV pour SIII

à partir de l'équation (87), i.e. $\nu = 1$.
Ces valeurs sont à comparer à celles trouvées plus haut, i.e.

ε_δ^s = - 50.0 MeV pour SkM

ε_δ^s = - 35.8 MeV pour SIII

Ce résultat pouvait en réalité être prévu à partir de la considération de l'équation (74). Cette équation indique en effet que la contribution à l'énergie de surface de $H(\rho)$ est égale à celle des termes en gradients. Or l'approximation de proportionnalité des densités annule la majeure partie de la contribution de ces derniers. En effet le potentiel de symétrie s'écrit en réalité, au lieu de (82) :

$$(\delta\rho)^2\left[\rho\,\varepsilon_\delta(\rho)+\epsilon\,\rho^{12}\right]+\varepsilon_1\left(\vec{\nabla}(\delta\rho)\right)^2 \quad (87)$$

où ϵ_1 est une constante et $\delta\rho = \frac{\rho_n(r)-\rho_p(r)}{\rho}$ l'excès local de neutrons. La contribution de ce dernier terme est négligée par l'approximation considérée

et celle du terme en ϵ est très faible, comme on peut en juger par l'examen de l'équation (86). On manque ainsi à peu près *la moitié* de l'énergie de symétrie de surface.

On voit donc que *l'approximation de proportionnalité des densités de neutrons et de protons est très mauvaise quant au calcul de l'énergie de symétrie de surface* : on manque la vraie valeur par un facteur ~ 2.

Nous verrons dans le paragraphe consacré à l'étude de la résonance dipolaire que cet effet a conduit récemment à des fausses estimations de ε_δ^s.

Nous terminerons cette section par l'étude de l'évolution des diffusivités effectives des densités de neutrons et de protons (cf. éq. (44)).

La figure suivante montre la variation de t_{eff}^q en fonction de l'asymétrie I de 0 à 0.2. Les courbes sont tout à fait semblables pour les 2 interactions : t_{eff}^n augmente régulièrement tandis que t_{eff}^p diminue légèrement, passe par un minimum avant de croître. On peut comprendre ces évolutions à partir de l'expression de t_{eff}^q :

$$t_{eff}^q = \frac{t}{4 \ln 3} \ln \frac{(10)^{\frac{1}{\nu_q}} - 1}{\left(\frac{10}{9}\right)^{\frac{1}{\nu_q}} - 1} \qquad (88)$$

et des éqs. (58), (60) et (62), qui permettent d'obtenir analytiquement la dépendance de t_{eff}^q en fonction de I.

Quand I augmente, t, qui va comme $1/\sqrt{K}$, augmente essentiellement parce que le terme d'asymétrie de l'incompressibilité nucléaire est négatif pour la quasi totalité des interactions effectives utilisées.* Cela semble également confirmé par l'analyse expérimentale de la résonance monopolaire isoscalaire dans des séries d'isotopes [Bu-80]. (A notre connaissance, la seule exception se trouve dans un calcul de Haensel [Ha-81] .

---

*Cf. Section (I.3)

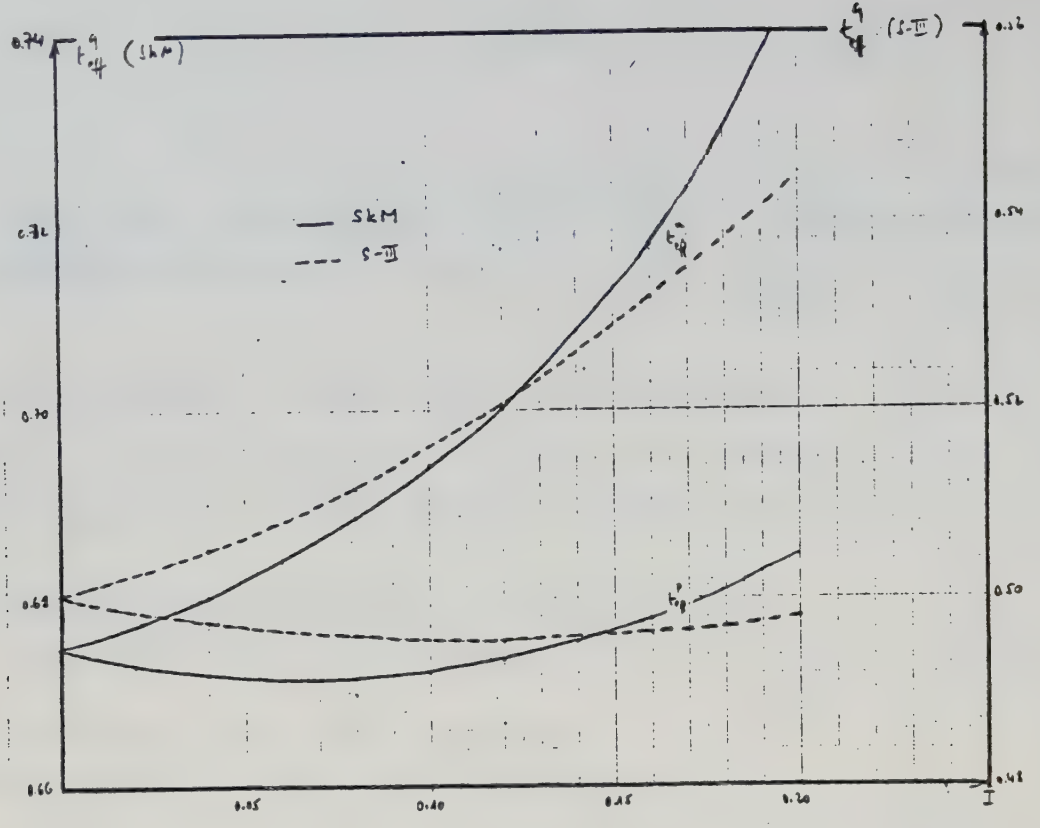


Fig. II.4

D'autre part la fonction Ln dans (88) peut se développer en puissances de ν :

$$\ln \frac{(10)^{\frac{1}{\nu_q}}-1}{\left(\frac{10}{9}\right)^{\frac{1}{\nu_q}}-1} \simeq \ln\left(\frac{\ln 10}{\ln \frac{10}{9}}\right) + \frac{1}{\nu_q}\ln 3 + \frac{1}{6\nu_q^2}(\ln 3)\left(\ln \frac{10}{3}\right) \qquad (89)$$

On obtient alors le développement suivant de t_{eff}^q :

$$t_{eff}^q = a_1 t_\infty + \frac{t_{aut}}{4} \pm a_2 \frac{(t_{aut})^2}{t_\infty} \mp \frac{\varepsilon_\delta^\nu}{\lambda_{nm}} t_{aut}\left(\frac{1}{4} + 2a_2\frac{t_{aut}}{t_\infty}\right) I \qquad (90)$$

$$+ I^2\left[a_1\sigma t_\infty + \frac{\varepsilon_\delta^\nu}{8\lambda_{nm}}\left(1+3\frac{\varepsilon_\delta^\nu}{\lambda_{nm}}\right)t_{aut} + a_2\frac{t_{aut}^2}{t_\infty}\left(\frac{\varepsilon_\delta^\nu}{\lambda_{nm}}\left(1+4\frac{\varepsilon_\delta^\nu}{\lambda_{nm}}\right)-\sigma\right)\right]$$

où le signe - correspond à t_{eff}^n et le signe + à t_{eff}^p .

σ caractérise la variation, difficile à calculer analytiquement, de t avec I :

$$t = t_\infty (1 + \sigma I^2)$$

et on a posé :

$$a_1 = \frac{1}{4\ln 3}\ln\left(\frac{\ln 10}{\ln \frac{10}{9}}\right) = 0.701885$$

$$a_2 = \frac{1}{24}\ln\frac{10}{3} = 0.050136$$

En utilisant les valeurs ci-contre (obtenues à l'approximation ITF avec spin-orbite), on trouve pour SkM :

	SkM	S-III
t	0.89043	0.64159
t_{mt}	0.19111	0.19062
ε_δ^ν	30.746	28.162
λ_{nm}	-15.771	-15.852
σ	0.9029	0.5798

$$t_{eff}^q = 0.6748 \pm 0.1012\ I + 0.8155\ I^2$$

et pour S-III :

$$t_{eff}^q = 0.5008 \pm 0.0948\ I + 0.4735\ I^2$$

Ces fonctions reproduisent très bien les courbes exactes jusqu'à $I \sim 0.15$, où l'on commence à voir des effets d'ordre supérieur.

Plus directement : on comprend que quand I augmente

$$\nu_p = \frac{t}{t_{mt}^p}$$

augemente car t et $1/t_{mt}^p$ augmentent. Le facteur logarithme dans (88) étant une fonction décroissante de ν_q, on voit qu'on a 2 tendances opposées qui se neutralisent à peu près : pour les faibles asymétries, c'est le facteur logarithme qui l'emporte et t_{eff}^p diminue : *cela correspond au fait que le champ vu par les protons est plus attractif.* Ensuite c'est la variation de t qui l'emporte car le facteur logarithme approche de sa valeur asymptotique : *cela correspond à un effet d'énergie de symétrie à la surface qui entraîne les protons.*

Au contraire pour les neutrons, $\nu_n = t/t_{mt}^n$ diminue car t_{mt}^n varie rapidement ($\sim 1/\sqrt{\lambda_n}$). Donc t et le facteur logarithme augmentent ensemble et l'on a une variation monotone de t_{eff}^n.

II.2 Du milieu semi-infini aux noyaux finis

On discute dans cette section dans quelle mesure les résultats du milieu semi-infini peuvent être considérés comme valables dans les noyaux finis. Concernant la surface, il s'agit de la variation de ν et de t.

Dans le cas des systèmes finis, apparaît dans l'équation d'Euler la variable r explicitement $(\Delta\rho = \rho'' + \frac{2}{r}\rho')$ si bien qu'il n'y a pas, là, d'intégrale première. La résolution self-consistante du système des 2 équations différentielles couplées est discutée dans la réf. [2] . Nous allons montrer maintenant que l'essentiel des propriétés géométriques des densités peut être obtenu à partir d'un calcul variationnel restreint.

II.2.1 - Variation de la densité au centre et de la diffusivité avec le nombre de nucléons A

Au centre du noyau, où l'on peut négliger les variations de la densité, l'équation d'Euler s'écrit :

$$\frac{\partial H}{\partial \rho} = \lambda = \frac{\partial E}{\partial A} = \varepsilon_v + \frac{2}{3}\varepsilon_s A^{-1/3} + \frac{1}{3}\varepsilon_c A^{-2/3} \qquad (91)$$

On développe $\frac{\partial H}{\partial \rho}$ autour de ρ_{nm} et on trouve :

$$\frac{\delta\rho}{\rho_{nm}} = 6\frac{\varepsilon_s}{K}A^{-1/3} + \frac{3}{K}\left[\varepsilon_c - 18(c+1)\frac{\varepsilon_s^2}{K}\right]A^{-2/3} \qquad (92)$$

Cette relation exprime l'effet de compression du noyau par la tension superficielle.

Si l'on écrit

$$\rho(r) = \frac{\rho_0}{\left(1+\exp\frac{r-R}{t}\right)^{\nu}}$$

On a :

$$A = \frac{4}{3}\pi R^3 \rho_0 \left[1 + 3\eta_\nu^{(0)}\frac{t}{R} + 6\eta_\nu^{(1)}\frac{t^2}{R^2}\right]$$

d'où, par différentiation :

$$\frac{\delta R}{R} = -\frac{1}{3}\frac{\delta \rho}{\rho} \qquad (93)$$

Bien que l'expression de ν trouvée au paragraphe précédent (cf. éq.9b) plus exacte (pour la raison indiquée en introduction) il est intéressant de voir l'effet du changement de la densité au centre sur

$$\nu_\infty = \sqrt{\frac{1-c}{1-b}}$$

On trouve :

$$\delta c = \frac{3}{K}\left[\delta(\rho^\nu H''') - \frac{\delta k}{k}\rho^\nu H'''\right] = -\frac{\delta\rho}{\rho}\left(3c^2+c+2\right)$$

$$\delta b = b(1-b)\frac{\delta\rho}{\rho}$$

et

$$\frac{\delta\nu}{\nu_\infty} = -\frac{1}{2}\frac{\delta c}{1-c} + \frac{1}{2}\frac{\delta b}{1-b} = 3\frac{\varepsilon_s}{K}A^{-1/3}\left(b + \frac{3c^2+c+2}{1-c}\right) > 0 \qquad (94)$$

Remarquons que l'asymétrie du profil nucléaire est *plus grande* dans un noyau fini que dans le milieu semi-infini. On a par exemple :

$$\frac{\delta\nu}{\nu_\infty} = 0.78\,A^{-1/3} \qquad \text{pour SkM}$$

$$\frac{\delta\nu}{\nu_\infty} = 0.47\,A^{-1/3} \qquad \text{pour S-III}$$

Dans un noyau A = 200, on aura alors :

$\frac{\delta\nu}{\nu_\infty} = 0.13 \Rightarrow \delta\nu = 0.58$ pour SkM $(\nu_\infty = 4.33)$

$\frac{\delta\nu}{\nu_\infty} = 0.08 \Rightarrow \delta\nu = 0.29$ pour S-III $(\nu_\infty = 3.61)$

Les changements de ν sont faibles et pratiquement on peut considérer que ν ne change pas. Le résultat est en fait inattendu puisque i) l'augmentation de la densité au centre augmente l'incompressibilité (qui est une fonction rapidement croissante de la densité) et ii) l'énergie de séparation diminue (en valeur absolue) : ces deux effets auraient suggéré que la diffusivité interne diminuât, que la diffusivité externe augmentât et que par conséquent ν diminuât. On voit que la tendance est en réalité contraire.

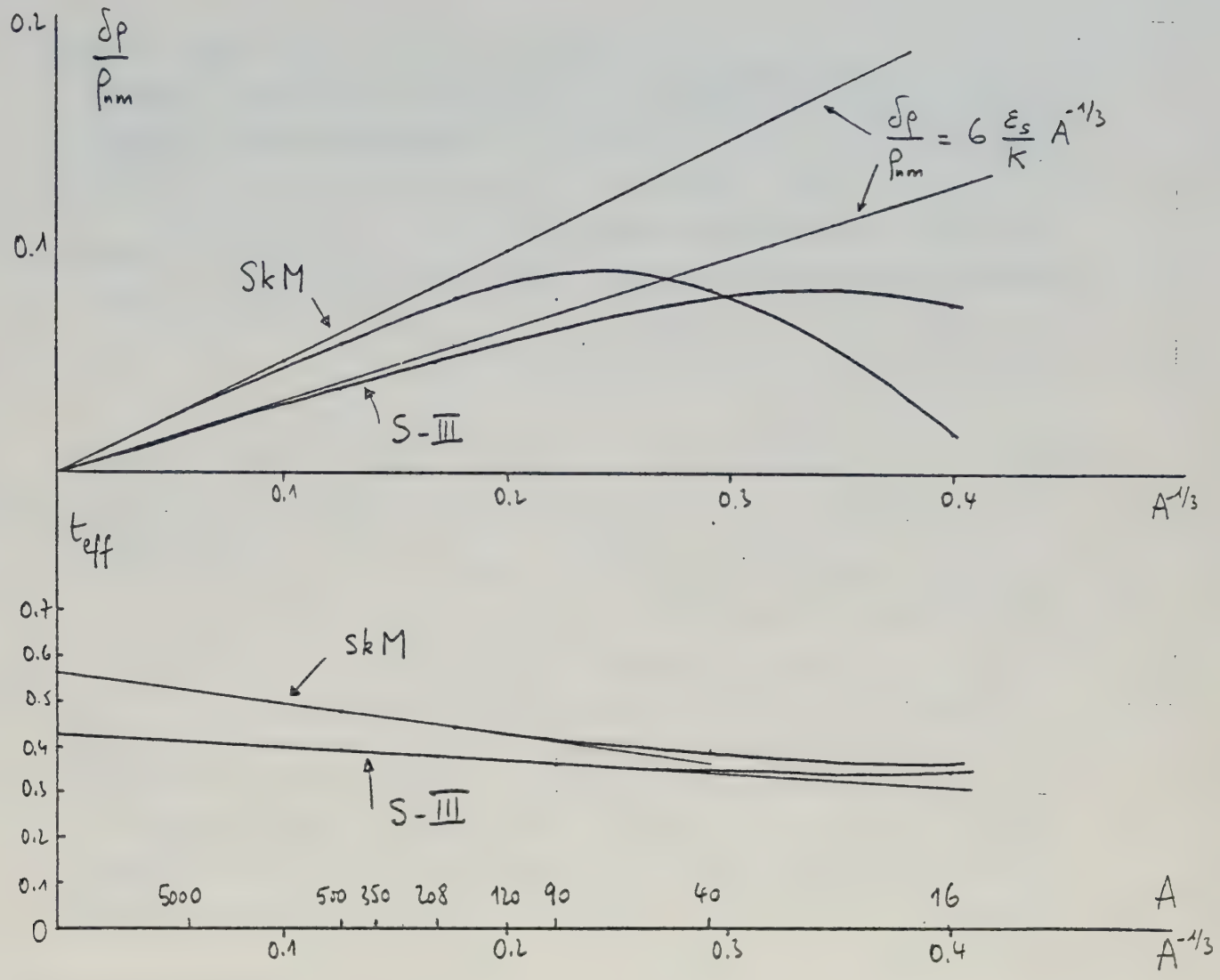
Le calcul de la variation de la diffusivité avec le nombre de nucléons A n'est pas simple ; il n'est du reste pas sûr que le développement leptodermique apporterait une réponse quantitativement fiable par cette variation, même en utilisant des distributions de (Fermi)$^\nu$, car le calcul de $\delta t/t_\infty$ nécessite le calcul du développement leptodermique en $A^{-1/3}$ jusqu'au terme *constant* en A :

$$E = \left(\frac{E}{A}\right)_\infty A + \varepsilon_s(\rho_0,t)\, A^{2/3} + \varepsilon_c(\rho_0,t)\, A^{1/3} + \varepsilon_0(\rho_0,t) \qquad (95)$$

$$\rho_0 \neq \rho_{0m} \qquad t \neq t_\infty$$

En effet comme $\varepsilon_s(\rho_0,t)$ est stationnaire par rapport aux variations de t (c'est ainsi qu'on a déterminé t), l'énergie de surface ne varie avec t qu'au second ordre en $\delta t/t_\infty$. Comme $\delta t/t_\infty$ est proportionnel à $A^{-1/3}$, cette variation est de l'ordre de A^0. On a donc besoin du calcul de $\varepsilon_0(\rho_0,t)$, de $\varepsilon_c(\rho_0,t)$ et des variations de ce dernier avec t et ρ_0 : à ces ordres, la non self-consistance de la solution restreinte (Fermi)$^\nu$ doit certainement jouer un rôle.

Nous avons donc préféré montrer dans la figure ci-dessous le résultat du calcul ITF self-consistant concernant la variation de la diffusivité et également de la densité au centre.



Pour la force SkM dont l'incompressibilité est conforme aux récentes mesures de la résonance monopolaire ($K \simeq 220$ MeV). On voit que la variation de t est d'environ 30 % depuis la région des noyaux légers ou moyens et la matière nucléaire semi-infinie. Pour S-III, la variation de t est encore importante (15 à 20 %). Il ne faut donc pas chercher à comparer directement la valeur de t_∞ donnée par une interaction à la valeur expérimentale déduite d'expériences de diffusion : l'extrapolation vers la matière infinie modifie notablement l'estimation.

En ce qui concerne l'effet de compression du volume du noyau par la tension superficielle, les corrections de courbure au terme en $A^{-1/3}$ de l'équation (95) sont d'autant plus importantes que l'incompressibilité K est faible. Dans ce cas, la figure montre aussi qu'on atteint une densité leptodermique véritable qu'à partir des noyaux de masse $A > 60$. Au-dessous de cette masse, il n'y a pas encore une nette distinction entre une partie de volume à densité à peu près constante et une partie de surface : le noyau n'est *que* surface.

Dans le cas des noyaux réels où, à cause de l'interaction coulombi l'asymétrie neutron-proton $I = \frac{N-Z}{A}$ augmente avec A, on peut faire les remarques qualitatives suivantes :

i) les considérations discutées dans le cas semi-infini sur l'effet d'une augmentation de I sur les diffusivités effectives de neutrons et de protons reste valables puisque l'effet de masse joue a priori autant sur les uns que sur les autres. Quand on considère une chaîne d'isotopes d'un même élément, la diffusivité effective des neutrons augmente régulièrement alors que la diffusivité effective des protons, soumise à 2 effets contradictoires (celui de t et celui de ν_p), diminue puis reste pratiquement constante.

ii) Les calculs ITF ou MTF dans les noyaux finis montrent que l'interaction coulombienne ne joue pratiquement pas sur les diffusivités, mais seulement sur les rayons carrés moyens (dans la mesure où elle tend à repousser les protons vers l'extérieur).

Nous verrons dans le prochain chapitre que ces considérations aident à rendre compte de l'évolution du paramètre de densité de niveau dans une chaine d'isotopes ou d'isobares.

II.2.2 - Comparaison avec une approche plus macroscopique et une approche plus microscopique

Les conclusions de la présente étude concernant les diffusivités effectives neutron et proton sont en désaccord à peu près complet avec celles de Myers et von Groote (My-v G. – 76) que l'on peut résumer comme suit :

i) la diffusivité des protons est supérieure à celle des neutrons, dû à la répulsion coulombienne.

ii) En conséquence, l'asymétrie locale $\delta(r) = [\rho_n(r) - \rho_p(r)] / \rho(r)$ doit changer de signe et devenir asymptotiquement négative avec pour limite -1 .

iii) Le modèle, alimenté des données expérimentales, fournit comme diffusivité limite du milieu semi-infini la valeur (0.45 ± 0.02) fm.

Nous avons vu que, dans le modèle semi-classique discuté ici,

i) les effets d'asymétrie font $t_n > t_p$

ii) En conséquence $\delta(r)$ ne change pas de signe et a pour limite +1

iii) La valeur limite de t est déterminée par l'énergie de surface, la masse effective et l'incompressibilité nucléaire. L'interaction SkM, à laquelle correspond la valeur t_{eff} = 0.70 fm, fournit une limite inférieure, dans la mesure où son énergie de surface est un peu trop faible.

Les raisons des désaccords ne sont pas localisables facilement. Sans aucun doute, la non-self consistance du calcul de Myers et Von Groote joue un rôle dans la mesure où il s'agit ici de propriétés géométriques fort détailléesdes densités nucléaires. En particulier la formation de la peau de neutrons n'est pas couplée par ces auteurs à la détermination

des valeurs des diffusivités rendant stationnaire la somme : énergie de surface plus énergie de Coulomb. Dans la discussion du paragraphe II.1.3, où cependant l'interaction coulombienne n'était pas incluse, la détermination précise de l'énergie de symétrie de surface nécessitait le calcul de α_0 -la peau de neutron- à partir de l'équation d'Euler.
La validité des conclusions de la discussion qualitative de l'action combinée de l'énergie de symétrie de volume, de surface et de la répulsion coulombienne est confirmée par les résultats des calculs self-consistants présentés dans les références [2] et [3]. Enfin la fonctionnelle ITF donne une meilleure description de la surface nucléaire que l'approximation de Thomas-Fermi pure utilisée par Myers et Von Groote ; celle-ci conduit à des distributions de densités qui s'annulent en un point de l'espace.

Notre analyse est, au contraire, en accord avec l'étude de F. Tondeur [T-79] des profils des densités nucléaires à partir de calculs HF + BCS utilisant le formalisme de densité d'énergie.

Tondeur sépare également la surface en une partie interne et une partie externe, en utilisant un critère qui nous paraît cependant peu naturel : au lieu de considérer le point d'inflexion comme séparation entre les 2 régions, il prend le point R_5 correspondant à la demi-densité centrale ; considérant alors les points R_1 et R_9 où la densité a chuté respectivement de 10 % et 90 %, il définit des épaisseurs de surface interne et externe s_{in} et s_{ext} par :

$$s_{in} = R_5 - R_1$$

$$s_{ext} = R_9 - R_5$$

Les figures ci-après illustrent les principaux résultats obtenus.
La figure 3 montre l'effet de l'augmentation du rapport $I = \frac{N-Z}{A}$ le long de la vallée de stabilité : $s^{(n)}$ augmente, $s^{(p)}$ reste pratiquement constant.

La figure 4 montre que les épaisseurs de surface interne des protons et des neutrons sont, en moyenne, égales : cela correspond, dans

notre discussion du paragraphe II.1.3 à la remarque que t est le même pour les protons et les neutrons. On voit aussi que l'épaisseur de surface externe des neutrons est plus grande que celle des protons : cela correspond à l'évolution de ν_p - qui augmente avec I- et de ν_n - qui diminue quand I augmente.

Les dissymétries de surface sont plus grandes dans notre étude que dans celle de Tondeur : cela provient certainement de la définition choisie par cet auteur pour opérer la distinction surface interne-surface externe. Une étude semblable prenant le point d'inflexion comme point de référence accentuerait vraisemblablement les conclusions obtenues par Tondeur dans le sens d'une plus grande dissymétrie de la surface nucléaire, en accord avec ce que nous obtenons.

II.3 Sur la densité de saturation de la matière nucléaire

Pearson et al. [P-80] font état d'un désaccord de $\sim$ 3-4 % entre l'approche de Goutte Liquide et l'approche HF concernant la détermination de rayon de matière nucléaire r_0. La densité de saturation ρ_{nm} et r_0 sont reliés par la relation :

$$r_0 = \left(\frac{3}{4\pi \rho_{nm}} \right)^{1/3} \qquad (96)$$

La valeur couramment extraite de l'examen des rayons de charge est de l'ordre de $r_0 = 1.17 - 1.18$ fm, ce qui correspond à un moment de saturation $k_F = 1.29\text{-}1.30$ fm^{-1}. Une telle valeur est cependant trop faible pour des calculs HF utilisant une interaction effective, comme nous allons le montrer rapidement. L'interaction S-III par exemple, possède un tel moment de saturation. Mais elle conduit à une épaisseur de surface trop faible, et ceci par le mécanisme indirect suivant : l'expression donnant le rayon carré moyen d'une distribution de Fermi (qu'on utilise ici pour simplifier la discussion qualitative) s'écrit :

$$\langle r^2 \rangle = \frac{3}{5} \tilde{r}_0^2 A^{2/3} + \pi^2 t^2$$

$$\tilde{r}_0 = \left(\frac{3}{4\pi \rho_0} \right)^{1/3} \qquad (\tilde{r}_0 < r_0 \text{ car } \rho_0 > \rho_{nm}) \qquad (97)$$

On conçoit alors que plus r_0 est grand, plus $\tilde{r}_0$ le sera et plus t doit être petit pour conserver une valeur donnée de $\langle r^2 \rangle$. Cela ne peut être obtenu que par une grande valeur de l'incompressibilité K (cf. éq.(41-c). (On pourrait imaginer de diminuer la valeur du numérateur de (41-c), mais l'équation (43) montre qu'on diminuerait alors l'énergie de surface).
Il y a donc une corrélation entre K et r_0 (cf. également [BGG-76]). Comme l'analyse de la résonance monopolaire isoscalaire conduit à K $\simeq$ 220 MeV, les valeurs résultantes pour r_0 sont de l'ordre de $r_0 \simeq 1.12\text{-}1.14$ fm, i.e. un moment de saturation $k_F \simeq 1.34\text{-}1.36$ fm^{-1}, d'où le désaccord.

Il nous semble qu'il faille rechercher l'explication dans la *sous-estimation de l'épaisseur de surface* à laquelle conduisent *et* l'utilisation de distributions de Fermi pour représenter les densités (cf. section II.1.2.) *et* les calculs de Thomas Fermi dont Myers et Swiatecki se sont servis pour déterminer certains coefficients de leur modèle, notamment le coefficient de raideur Q. Dans la réf.[MySw-69] les auteurs signalent que la valeur de la diffusivité t_∞ obtenue dans le milieu semi-infini est de 0.46 fm et la même conclusion est tirée dans la réf. [MyvG-76] .
Au contraire les résultats des sections précédentes montrent qu'une estimation raisonnable de la diffusivité nucléaire dans le milieu semi-infini est de $\sim$ 0.70 fm. (Cette estimation tient compte de la *diminution* de l'épaisseur de surface des systèmes lourds aux noyaux légers -de l'ordre de 15%). Un tel écart entre les deux estimations de t_∞ ($\sim$ 65 %) suffit à expliquer, à notre avis, les différences concernant les estimations de r_o car dans l'équation (9), une sous-estimation de t ne peut être compensée que par une valeur plus grande de r_o .

Notons également que, dans le modèle de la Gouttelette, r_o est obtenu à partir du "rayon équivalent de distribution uniforme" des protons, donné par :

$$R_p = r_o A^{1/3} \left[1 + \bar{\varepsilon} + \frac{1}{3} (\bar{\delta} - I) \right] \qquad (98)$$

$$I = \frac{N-Z}{A}$$

$$\bar{\delta} = \frac{I + \frac{9}{8\delta} \frac{e^2}{r_o Q} \frac{Z^2}{A^{5/3}}}{1 + \frac{9}{4} \frac{\varepsilon_s^2}{Q} A^{-1/3}}$$

$$\bar{\varepsilon} = \frac{1}{K} \left[-2 \varepsilon_s A^{-1/3} + L \bar{\delta}^2 + \frac{3}{5} \frac{e^2}{r_o} \frac{Z^2}{A^{4/3}} \right]$$

On voit que l'asymétrie au centre du noyau $\bar{\delta}$ est sensible à la valeur de Q. Myers et Swiatecki discutent, dans la réf. [MySw-80] , la sensibilité de la peau de neutrons à différentes valeurs de Q : Q = 17 MeV (valeur trouvée dans la réf.[MySw-69]) et Q = 24 MeV et concluent que la seconde valeur donne un meilleur accord des différences de rayons carré moyens $\langle r_n \rangle - \langle r_p \rangle$ avec les calculs HF. On voit qu'une valeur plus élevée de Q diminue la valeur de $\bar{\delta}$ et par conséquent augmente la valeur du crochet dans l'équation (96). L'ajustement sur les valeurs

expérimentales des rayons de charge conduira alors à une valeur de r_o plus petite.

En conclusion, il nous semble que l'analyse de la diffusivité nucléaire marque la limite de l'approche macroscopique des propriétés géométriques des densités : la self-consistance de l'approche semi-classique est ici nécessaire. L'interdépendance des différents résultats mis en cause dans la présente discussion (incompressibilité, énergie de surface, dissymétrie du profil nucléaire) donne confiance en la méthode et suggère fortement que les valeurs de r_o utilisées dans les formules de masse sont sur-estimées[1]. Les valeurs suivantes nous paraissent meilleures :

$$r_o \simeq 1.13 \text{ fm}$$

i.e. $$k_F \simeq 1.35 \text{ fm}^{-1}$$

i.e. $$\rho_{nm} \simeq 0.165 \text{ fm}^{-3}$$

---

[1] Il faudrait évidemment une étude très détaillée pour localiser les répercussions sur les autres coefficients de la formule de masse.

CHAPITRE III

ASPECTS MACROSCOPIQUES DES DENSITÉS DE NIVEAUX NUCLÉAIRES CALCULS ITF A TEMPERATURE FINIE

III.1 Données expérimentales

Des progrès récents ont permis de mieux séparer les aspects microscopiques et macroscopiques des densités de niveaux excités des noyaux. Ces progrès permettent une comparaison avec les résultats et prédictions du modèle semi-classique plus précise que celle présentée dans la réf.[4] , où la discussion porte essentiellement sur la relation entre la masse effective de l'interaction et la densité de niveaux. Nous allons voir en particulier que certaines propriétés très fines (et cependant de type macroscopique) des densités de niveaux dans des chaines d'isotopes ou d'isobares sont bien décrites par l'approche semi-classique. On peut alors avoir une certaine confiance dans la dépendance en température des paramètres de la goutte liquide que fournit cette même approche. Cette "formule de masse chaude" constitue l'ingrédient de base pour le calcul de l'équation d'état de la matière nucléaire chaude (LLPR-78, BV-80, BB-80, BB-81), utilisée en astrophysique dans les modèles de supernovae. Elle peut être également utile en physique des ions lourds.

Les données expérimentales concernant les espacements moyens de niveaux obtenues par résonances neutroniques, sont le plus souvent traduites en terme de "paramètre de densité de niveaux", introduit par Bethe [Be-36] dans son modèle statistique : le noyau est considéré comme un gaz de fermions sans interaction distribués parmi les états d'un spectre uniforme. Aux énergies d'excitation considérées, (voisines du seuil ~ 8 MeV) les seuls niveaux individuels qui interviennent sont ceux voisins de la mer de Fermi et l'approximation du spectre equidistant -avec pour densité la densité moyenne du spectre réel près du niveau de Fermi ε_F - est satisfaisante. L'expression bien connue qui résulte du calcul

$$\rho(E) \sim \frac{e^{S(E)}}{E^{5/4}} \qquad \text{(III-1)}$$

avec $$S = 2aT = 2\sqrt{aE}$$

$$E = aT^2$$

où E représente l'énergie d'excitation (dont on a soustrait l'énergie de pairing, i.e. l'énergie nécessaire pour briser les paires) et T la température nucléaire[1], a été utilisée notamment par Gilbert et Cameron [GC-65] dans une étude systématique du paramètre de densité de niveau. Celui-ci est donné par

$$a = \frac{\pi^2}{6} g(\varepsilon_F) \qquad \text{(III-2)}$$

où $g(\varepsilon_F)$ représente la densité de niveau au voisinage de ε_F . Bien sûr la structure en couches du spectre individuel, non prise en considération dans le modèle, réapparaissait dans les énormes oscillations obtenues au passage des régions magiques autour de la valeur moyenne $\frac{a}{A} \sim \frac{1}{8}$.

Plusieurs auteurs ont considéré des modèles plus réalistes -mais encore solubles- de spectre à 1 particule (cf. l'article de revue [Hu-72]. Gilbert [Gi-68] montre que si l'on décrit le spectre à 1 particule d'un système de fermions non interagissants comme formé d'une composante uniforme à laquelle se surimpose une composante périodique, on obtient une représentation paramétrique en fonction de la température :

$$S = 2aT + f(T) \qquad \text{(III-3a)}$$

$$E = aT^2 + g(T) \qquad \text{(III-3b)}$$

où f et g sont des fonctions connues.

Dans ces équations, une partie correspond à la composante uniforme -celle qui correspond à l'aspect macroscopique- l'autre contient

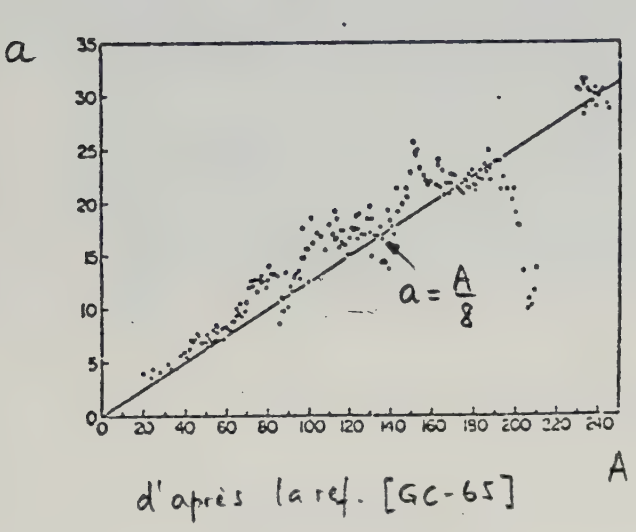
---

(1) La température nucléaire T peut être définie de la façon classique qui suit : on considère un intervalle d'énergie δE autour de l'énergie d'excitation E. On désigne par ε_i les niveaux individuels et par n_i (n_i = 0 ou 1) les nombres d'occupation de ces niveaux. On montre alors que la valeur moyenne de n_i , quand E décrit la bande δE , se paramétrise par

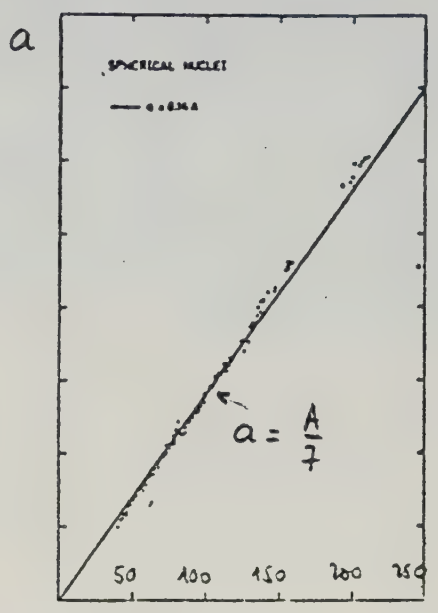
$$\bar{n}_i = \frac{1}{1+\exp\frac{\varepsilon_i - \varepsilon_F}{kT}}$$

les effets de couche- l'aspect microscopique.

Utilisant cette méthode, Kataria, Ramamurthy et Kapoor (KRK-78) sont capables, de très belle façon, d'extraire des données expérimentales des valeurs du paramètre a qui correspondent bien à une propriété macroscopique puisque toute structure a disparu de la courbe.



d'après la ref. [GC-65]



d'après la réf [KRK 78]

L'analyse de ces données n'est cependant pas dépourvue d'ambiguité.

La dépendance moyenne du paramètre a est $\frac{a}{A} \sim \frac{1}{7}$, mais une étude plus détaillée conduit [KRK-78] à l'expression :

$$\frac{a}{A} = 0.176 \left(1 - A^{-1/3}\right) \qquad \text{(III-4a)}$$

Dans un travail plus récent (KR-80) à partir de calculs modèles à température finie utilisant des puits de W.S (non self-consistants), l'expression suivante est proposée :

$$\frac{a}{A} = 0.08 - 0.16\, A^{-1/3} + 2.04 \left(\frac{1}{S_n} + \frac{1}{S_p}\right) A^{-1/3} \qquad \text{(III-4b)}$$

où S_n et S_p représentent les énergies de séparation des neutrons et des protons du noyau A.

Alors que dans (III.4a) le terme de surface est négatif, il semble que dans (III.4b) il soit devenu positif, et le terme de volume a été divisé par 2. Posons alors la question :

Comment varie l'énergie de surface avec la température ?

L'expression (III.4b) ne permet pas tout à fait de répondre à la question car dans S_n et S_p sont dissimulés des effets de surface. Il semble donc difficile d'extraire directement des données expérimentales une réponse nette à la question posée -voire à d'autres concernant le terme de volume.

Dans la mesure cependant où ce qui est obtenu dans l'analyse de KRK correspond bien à la partie macroscopique de l'excitation nucléaire, la confrontation à l'approche semi-classique permet de lever certaines ambiguités.

III.2 Calculs modèles

III.2.1 - Le puits infini ou la boîte de Hill et Wheeler [HW-53]

Inversant l'expression reliant le nombre de nucléons A_q de type $q\,(q=n,p)$ au volume V, à la surface S et au moment de Fermi

$$A_q = 2\left[\frac{V}{6\pi^2}k_{F_q}^3 - \frac{S}{16\pi}k_{F_q}^2\right] \qquad \text{(III-5)}$$

on obtient :

$$k_{F_q} = \left(\frac{3\pi^2 A_q}{V}\right)^{1/3}\left[1 + \frac{S}{24\pi A_q}\left(3\pi^2\frac{A_q}{V}\right)^{2/3}\right] \qquad \text{(III-6)}$$

et pour la densité de niveau individuels au voisinage du niveau de Fermi :

$$g_q = \frac{dA_q}{d\varepsilon_{F_q}} = \frac{dA_q}{dk_{F_q}}\frac{dk_{F_q}}{d\varepsilon_{F_q}} = \frac{2m}{\hbar^2}\left(\frac{V}{2\pi^2}k_{F_q} - \frac{S}{8\pi}\right) \qquad \text{(III-7)}$$

ou, en utilisant III-6 :

$$\frac{\hbar^2}{2m} g_q = \frac{V}{2\pi^2} \left(3\pi^2 \frac{A_q}{V}\right)^{1/3} - \frac{S}{8\pi} \qquad \text{(III-8)}$$

Il ne faudrait pas conclure pour autant que la contribution de la surface à g_q est négative. Il est bien connu -depuis que Swiatecki l'a mis en évidence dans son célèbre article [Sw-51] sur la surface nucléaire- que la boite de Hill-Wheeler contient un piège -dans lequel du reste Feenberg est tombé en 1943. Si l'on garde, dans III-8, la densité *moyenne* $\frac{A_q}{V}$ constante, la densité au centre $\tilde{\rho}$ est plus élevée d'une quantité qui varie comme $A^{-1/3}$ (cf. éq. (89)) et le terme de surface dans III-8 est la superposition d'un terme de surface véritable et d'un terme provenant du volume. La dépendance en A_q de g_q doit être déterminée en gardant la densité *au centre* (i.e. k_{F_q}) constante ; si l'on écrit III-5 sous la forme

$$A_q = \frac{k_F^3}{3\pi^2} \left[V - \frac{3}{8\pi} \left(\frac{V}{2\pi^2 A} \right)^{1/3} S \right]$$

on voit que la densité au centre s'écrit :

$$\tilde{\rho} = \frac{k_F^3}{3\pi^2} = \frac{A_q}{V - t_q S} \equiv \frac{A_q}{\Omega} \qquad \text{(III-9)}$$

où $$t_q = \frac{3}{8\pi} \left(\frac{V}{3\pi^2 A_q} \right)^{1/3}$$

représente l'épaisseur de la surface de la boîte. Reportant III-9 dans III-8, on a :

$$\frac{\hbar^2}{2m} g_q = \frac{\Omega}{2\pi^2} \left(\frac{3\pi^2 A_q}{\Omega} \right)^{1/3} + \frac{S}{16\pi} \qquad \text{(III-10)}$$

i.e. une contribution *positive* de la surface. Finalement, le paramètre de densité de niveau s'écrit :

$$a = \frac{\pi^2}{6}(g_n + g_p) = \frac{\pi^2}{4} \frac{2m}{\hbar^2 k_F^2} A \left[1 + \frac{1}{2\pi} \left(\frac{3\pi^2}{2} \right)^{2/3} A^{-1/3} \right] \qquad \text{(III-11)}$$

Numériquement, en prenant $k_F \simeq 1.33\ fm^{-1}$:

$$a \simeq \frac{A}{15}\left(1 + 0.96\, A^{-1/3}\right) \qquad \text{(III-12)}$$

le terme de surface est trop petit pour reproduire les valeurs empiriques $a \simeq A/7$; cela est dû au fait que t_q (éq.(III-9)) est en quelque sorte une borne inférieure de l'épaisseur de surface d'un système quantique de particules indépendantes. Tout autre puits de potentiel de hauteur finie donnera naissance à des valeurs plus élevées de l'épaisseur de surface et par conséquent - nous le verrons plus loin- à des valeurs correctes du terme de surface du paramètre a.

Notons que l'analyse de l'Appendice de la Réf. [KRK_78] est erronée pour la raison discutée plus haut.

III.2.2 - L'oscillateur harmonique isotrope

Bien que dans ce cas on ne peut séparer clairement le volume de la surface, on peut obtenir un développement du paramètre a en puissances de $A^{-1/3}$ en utilisant la relation $\hbar\omega \simeq C A^{-1/3}$.

Le nombre de nucléons A_q est relié au nombre quantique N_q caractérisant le niveau de Fermi $\varepsilon_{F_q} = \left(N_q + \frac{3}{2}\right)\hbar\omega$ par :

$$A_q = \frac{1}{3}\left[N_q^3 + 6N_q^2 + 11N_q + 6\right]$$

que l'on peut inverser sous la forme :

$$N_q = (3A_q)^{1/3}\left[1 - 2(3A_q)^{-1/3} + \frac{1}{3}(3A_q)^{-2/3}\right]$$

on obtient alors :

$$a = \frac{\pi^2}{6}\left[\frac{dA_n}{d\varepsilon_{F_n}} + \frac{dA_p}{d\varepsilon_{F_p}}\right] = \frac{\pi^2}{3C}\left(\frac{3}{2}\right)^{4/3} A\left[1 + \frac{1}{3}\left(\frac{2}{3}\right)^{2/3} A^{-2/3}\right] \qquad \text{(III-13)}$$

Cette expression diffère de celle de la référence [KR-80] où un terme de surface négatif est donné -par erreur à notre avis.

En prenant une valeur raisonnable $C \simeq 41$ MeV :

$$a = \frac{A}{5}\left(1 + 0.25\, A^{-1/3}\right) \qquad \text{(III-14)}$$

là aussi le terme correctif, de l'ordre de la courbure, est trop petit si l'on compare les valeurs données par III-14 aux valeurs expérimentales ; cela est dû à la trop rapide décroissance de la densité $\rho(r)$ dans le modèle d'oscillateur harmonique.

La conclusion de ces deux calculs modèles est toutefois identique : *la correction de taille finie au paramètre de densité de niveau est positive.*

III.3 Etude semi-classique self-consistante et détermination d'une formule de masse chaude

La référence 4 présente une analyse semi-classique du paramètre de densité de niveau, à partir de la dérivation d'une expression analytique simple :

$$a = \frac{\pi^2}{4} \sum_q \int \frac{2m^*}{\hbar^2 k_{F_q}^2(r)}\, \rho_q(r)\, d\vec{r} = \sum_q a_q \qquad \text{(III-15)}$$

où $k_{F_q}(r) = \left[\frac{3\pi^2}{2}\rho_q(r)\right]^{1/3}$ représente le moment de Fermi local. Rappelons-en ici les conclusions principales :

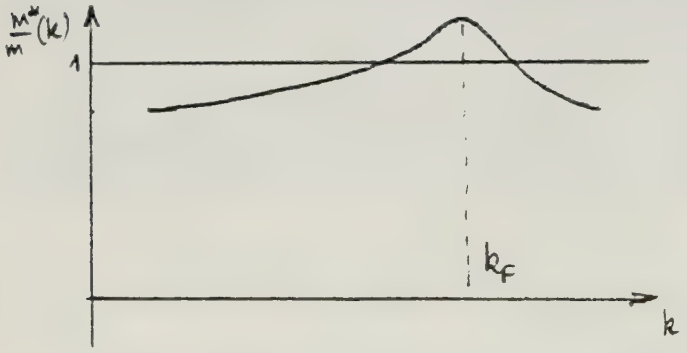
i) comme dans le milieu infini, l'interaction n'apparaît *directement* dans l'expression de la chaleur spécifique nucléaire que sous la forme de la masse effective (indirectement, bien sûr, dans la détermination des densités d'équilibre).

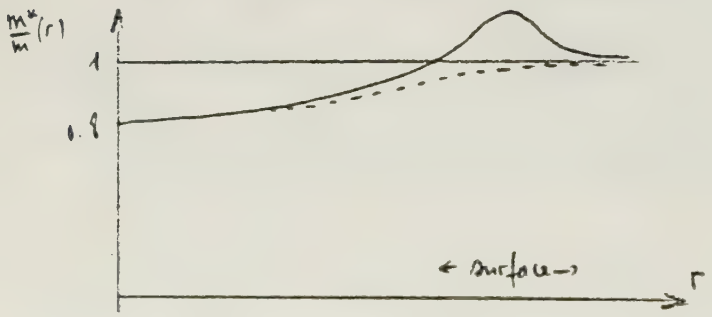
ii) Le paramètre de densité de niveau apparaît comme la valeur moyenne de l'*inverse* de l'énergie cinétique effective locale : la contribution de la surface, où le moment de Fermi local tend vers zéro, est donc très

importante. Le dernier nucléon contribue pour 20 % à la valeur de a dans le plomb et pour 50 % dans le calcium !

iii) La comparaison avec l'expérience confirme qu'un bon accord nécessite une valeur de la masse effective près du niveau de Fermi de l'ordre de 1.1 - 1.2 . La même conclusion est tirée de l'examen des densités de niveaux individuels $g(\varepsilon_F)$ obtenus dans les calculs HF des noyaux finis. Ce qu'atteint, ou plutôt ce à quoi est sensible l'approche semi-classique, c'est seulement l'extrapolation de $g(\varepsilon_F)$ dans le milieu infini. Il est satisfaisant de constater que cette signature est significative pour l'étude des effets de taille finie sur le paramètre de densité de niveau dans les noyaux.

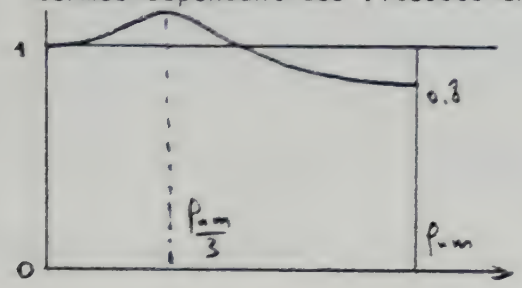
On sait [JLM-76] que si l'on tient compte, au-delà de l'approximation HF, du couplage des niveaux individuels aux vibrations collectives, on obtient une dépendance en énergie de la masse effective, avec un pic au voisinage du niveau de Fermi de l'ordre de 1.1 à 1.2. Dans la matière nucléaire, l'allure de la courbe $m^*_{k_F}(k)$ est figurée ci-contre. Puisque, dans une description semi-classique, les états proches du niveau de Fermi sont ceux des nucléons de la surface, la courbe $m^*(r)$ dans un noyau fini devrait avoir l'allure suivante :





(on a figuré en pointillé la courbe obtenue avec les interactions de Skyrme habituelles). On en déduit que la dépendance en ρ de m^* doit être de la forme ci-après. Une telle dépendance pourrait être obtenue en incorporant une dépendance en densité dans les

termes dépendant des vitesses en t_1 et t_2. (Notons cependant qu'il s'agirait là d'inclure dans l'interaction effective, à utiliser dans des calculs HF, des effets qui sont au-delà de l'approximation HF).



Nous allons maintenant dériver les dépendances en température de certains coefficients de la formule de masse.

L'examen de la fig.1 de la réf.[4] où l'on a tracé l'évolution de a en fonction de A pour différentes forces et des systèmes avec N = Z sans interaction coulombienne (pour avoir un tracé continu depuis les systèmes finis jusqu'à la matière nucléaire), montre sans ambiguité que l'énergie de surface augmente avec la température (contrairement à ce qu'indique l'équation III-4a).

L'utilisation du développement leptodermique permet, à partir de l'équation (III-15), de déterminer de façon systématique la variation des différents coefficients de la formule de masse avec la température :

$$\frac{E}{A} = \varepsilon_v + a_v T^2 + \left(\varepsilon_s + a_s T^2\right) A^{-1/3} + \left(\varepsilon_c + a_c T^2\right) A^{-4/3} \qquad \text{(III-16)}$$
$$+ \left(\varepsilon_\delta^v + a_\delta^v T^2\right) I^2 + \left(\varepsilon_\delta^s + a_\delta^s T^2\right) I^2 A^{-1/3} + \left(\varepsilon_{coul} + a_{coul} T^2\right) Z^2/A^{4/3}$$

Dans les fonctionnelles de type Skyrme, c'est l'inverse de la masse effective qui est une fonction linéaire de la densité

$$\frac{m}{m^*}(\rho) = 1 + \frac{2m}{\hbar^2}\frac{1}{16}\left[3t_1 + t_2(5+4x_2)\right]\rho \qquad \text{(III-17)}$$

Cette forme, introduite dans (III-15) ne permet pas un développement leptodermique simple. Mais en remarquant que les valeurs de m^*/m sont voisines de 0.8 (à la saturation de la matière nucléaire symétrique), on écrira

$$\frac{m^*}{m}(\rho) \simeq 1 - 3\rho \qquad \text{(III-18)}$$

$$3 = \frac{2m}{\hbar^2}\frac{1}{16}\left[3t_1 + t_2(5+4x_2)\right]$$

On obtient alors, en utilisant l'équation (II-34), le développement leptodermique suivant de a :

$$a = \frac{\pi^2}{4}\frac{2m}{\hbar^2 k_{F_0}^2} A \left\{1 + \frac{3t}{\tilde{r}_0} A^{-1/3}\left[\eta_{\frac{1}{3}}^{\circ} - \eta_{\circ}^{\circ}\right] + \frac{3t^2}{\tilde{r}_0^2} A^{-4/3}\left[\eta_{\frac{2}{3}}^{(1)} - \eta_{\frac{1}{3}}^{\circ}\eta_{\circ}^{\circ} + (\eta_{\circ}^{\circ})^2 - \eta_{\circ}^{\circ}\right]\right. \qquad \text{(III-19)}$$

$$\left. - b\rho_0\left(1 + \frac{3t}{\tilde{r}_0} A^{-1/3}\left[\eta_{\frac{1}{3}}^{\circ} - \eta_{\circ}^{\circ}\right] + \frac{3t^2}{\tilde{r}_0^2} A^{-4/3}\left[\eta_{\frac{2}{3}}^{\circ} - \eta_{\frac{1}{3}}^{\circ}\eta_{\circ}^{\circ} + (\eta_{\circ}^{\circ})^2 - \eta_{\circ}^{\circ}\right]\right)\right\}$$

avec

$$\tilde{r}_0 = \left(\frac{3}{4\pi\rho_0}\right)^{1/3}$$

Terme de volume a_v :

On obtient l'expression usuelle de la théorie de Landau des liquides de Fermi [NP-66]

$$a_v = \frac{\pi^2}{4}\frac{2m^*}{\hbar^2 k_F^2} \qquad \text{(III-20)}$$

En utilisant des valeurs de m^*/m dans le domaine (0.8-1.2) et pour k_F des valeurs de 1.2 à 1.4 fm^{-1}, on obtient un domaine de valeurs $\left(\frac{1}{20} - \frac{1}{10}\right)$ pour a_v . Ce domaine ne contient pas la valeur donnée dans l'équation (III.4a) mais contient celle de l'équation (III.4b).

Terme de surface a_s

Celui-ci s'écrit :

$$a_s = \frac{m}{m^*} a_v \left\{ \frac{3t_\infty}{r_0} \left([\eta^\circ_{\frac{v}{3}} - \eta^\circ_v] - (1-\frac{m^*}{m})[\eta^\circ_{\frac{v}{3}} - \eta^\circ_v] \right) - 6\frac{\varepsilon_s}{K}(1-\frac{1}{3}\frac{m^*}{m}) \right\} \quad \text{(III-21)}$$

Le terme en $\frac{\varepsilon_s}{K}$ est de l'ordre de 10 % du premier. On voit donc que a_s dépend essentiellement du rapport t_∞/r_0 (le facteur $\frac{m}{m^*} a_v$ ne dépend pas de m^*, cf. éq.(III-20) et le terme contenant $\eta^\circ_{\frac{v}{3}}$ est de l'ordre de 10 % du premier en raison du facteur $1-\frac{m^*}{m} \simeq 0.2$). Comme la contribution du terme de surface est du même ordre de grandeur que celle du terme de volume, il importe, si l'on veut faire une comparaison quantitative avec les données expérimentales, d'avoir une détermination raisonnable de t_∞. Les figures 1 et 2 de la référence 4 montrent que l'utilisation de la fonctionnelle ETF conduit à une sous-estimation du paramètre de densité de niveau d'environ 15 à 20 %. On rencontre là une limitation à l'utilisation self-consistante de la fonctionnelle ETF dont on sait qu'elle donne une épaisseur de surface trop petite (cf. chapitre I). Il est donc meilleur d'utiliser la fonctionnelle MTF, construite précisément pour donner un bon accord global avec les résultats HF (énergies de liaison et propriétés géométriques). Notons également que conformément à l'expression (III-21) et contrairement au terme de volume a_v, a_s ne dépend quasiment pas de la masse effective. Il apparaît d'ailleurs que ce coefficient varie très peu pour des interactions pourtant assez différentes (voir table de la réf.[4]): notamment l'incompressibilité K de l'interaction ne joue pratiquement pas, alors qu'elle affecte sensiblement la diffusivité interne t_∞ (cf. chapitre II). Il se trouve en effet qu'elle affecte également la puissance ν, donc les coefficients η°_ν, de telle sorte qu'il y a compensation de la variation de t avec K. Le paramètre de densité de niveau mesure donc bien essentiellement la masse effective au voisinage du niveau de Fermi.

Termes d'asymétrie de volume et de surface :

Dans la paramétrisation de type Skyrme, l'inverse de la masse effective d'un type de particule (neutron ou proton) dépend linéairement de chacune des densités. Comme dans le cas symétrique, on utilisera pour la masse effective elle-même, la forme approchée :

$$\frac{m^*_n}{m} \simeq 1 - \beta\rho - \phi\rho_n = 1 - (\beta+\phi)\rho_n - \beta\rho_p$$

$$\frac{m^*_p}{m} = 1 - \beta\rho - \phi\rho_n = 1 - (\beta+\phi)\rho_p - \beta\rho_n$$

$$\beta = \frac{2m}{\hbar^2}\frac{1}{4}\left[t_1\left(1+\frac{x_1}{2}\right) + t_2\left(1+\frac{x_2}{2}\right)\right] \qquad \text{(III-23)}$$

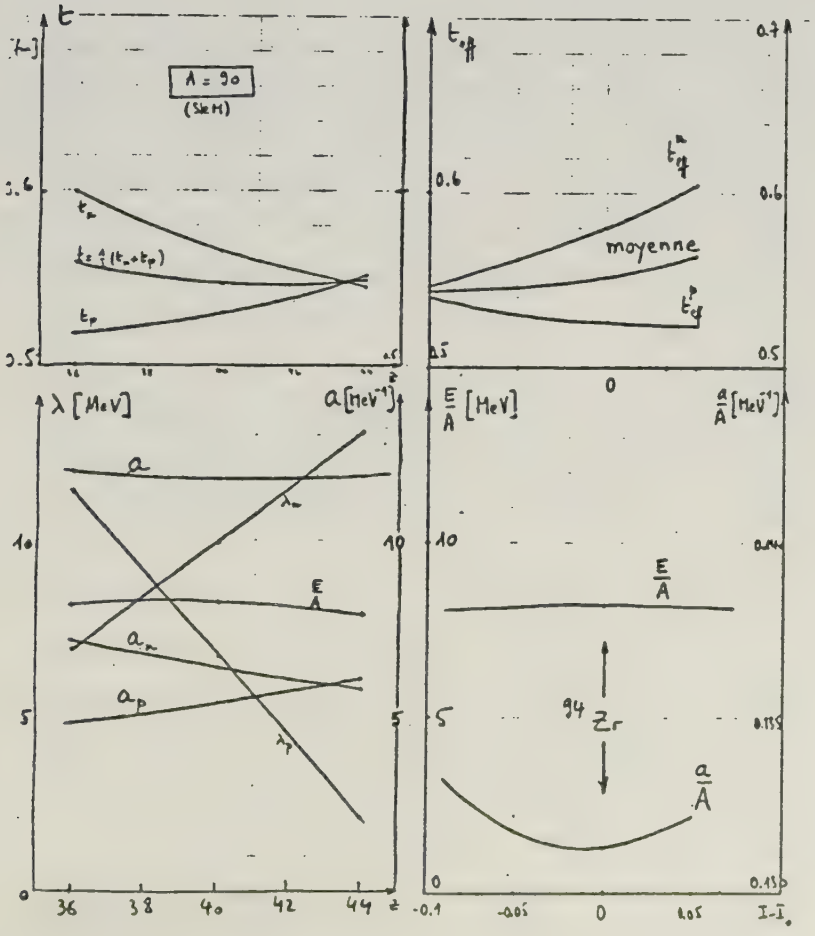
$$\phi = \frac{2m}{\hbar^2}\frac{1}{4}\left[t_2\left(\frac{1}{2}+x_2\right) - t_1\left(\frac{1}{2}+x_1\right)\right]$$

on obtient alors pour le terme de volume :

$$a_v^v = -\frac{m}{m^*}a_v\left\{\frac{1}{9}\left[1-(\beta+\phi)\rho_{nm}\right] + \frac{1}{\kappa}\left[1-2(2\beta+\phi)\rho_{nm}\right]\right\} \qquad \text{(III-24)}$$

Pourtant tout l'effet d'asymétrie n'est pas représenté par ce terme de volume, qui conduirait à une décroissance monotone du paramètre a avec l'asymétrie I. En fait, les effets de symétrie à la surface sont ici dominants sur les effets de symétrie de volume. Il est cependant difficile de voir cet effet au moyen d'une formule analytique simple.

Les figures ci-dessous montrent la variation du paramètre de densité de niveau dans une chaîne d'isobares et dans une chaîne d'isotopes dans la région de masse A = 90 et dans la région de masse A = 208. On montre également la variation des diffusivités effectives proton et neutron des noyaux considérés (obtenues par un calcul MTF self-consistant). Un minimum de a/A est obtenu dans les deux cas pour les chaînes d'*isotopes* au voisinage du noyau β -stable. Au contraire dans le cas des *isobares*, le minimum de a/A, présent dans les noyaux légers, disparaît dans la région des noyaux lourds au profit d'une évolution monotone correspondant à celle de t^n_{eff}.



force SkM

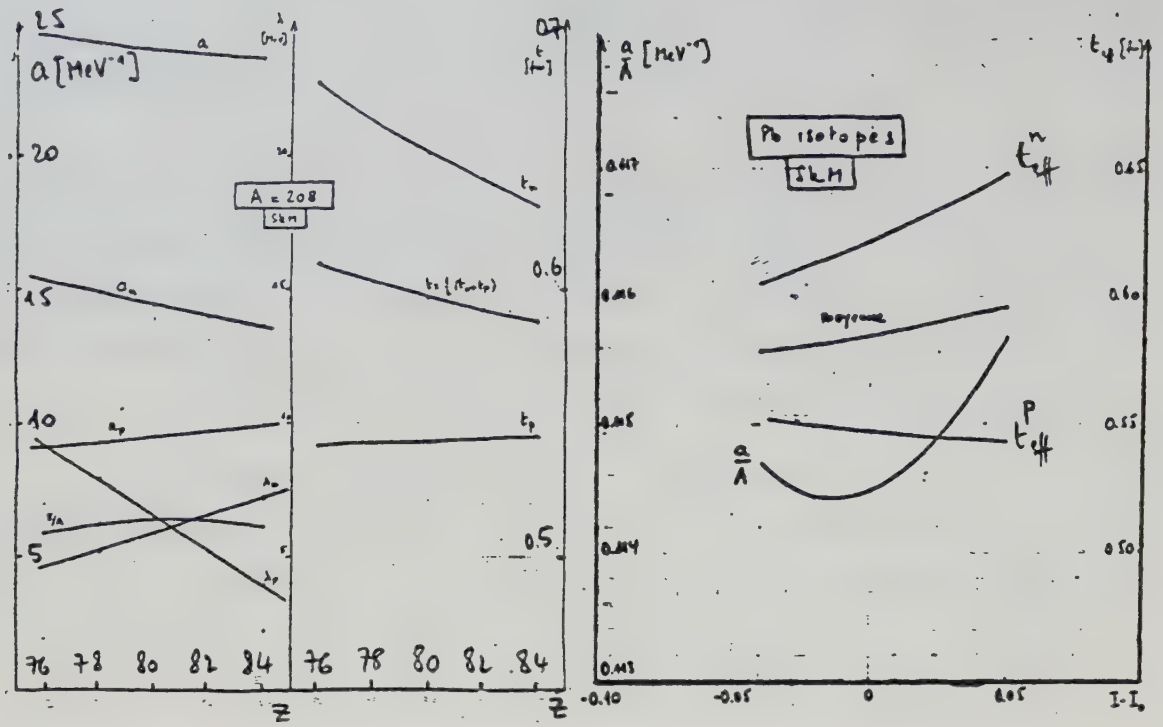
approximation MTF

$\lambda_{n,p}$: énergies de séparation

$a_{n,p}$: cf. eq. III.15

N : nombre de neutrons

N_0 : correspond à l'isotope le plus stable.



Ces courbes se comprennent aisément si l'on se reporte à la discussion sur les diffusivités effectives dans le milieu semi-infini et aux considérations qualitatives dans le cas des noyaux finis avec interaction Coulombienne, et si l'on note que dans (III-21) le terme dominant est le terme faisant intervenir la diffusivité.

La figure ci-dessous est tirée de la référence (KR.80) et montre que a/A est minimum, pour plusieurs chaînes d'isotopes, au voisinage du noyau β-stable. L'accord qualitatif entre l'analyse des données expérimentales et le modèle semi-classique suggère qu'on peut interpréter cet effet comme un effet de variation des épaisseurs de surface -et principalement de celle des neutrons.

Une étude plus détaillée, notamment de la courbure (voir figure ci-dessous) devrait donner plus d'informations sur les propriétés de symétrie de surface de l'interaction effective.

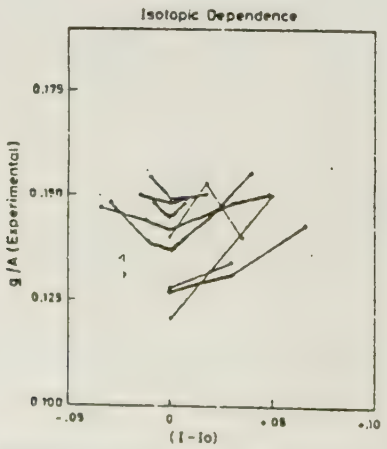


Fig. 12. Plots of the experimental values of a/A versus the asymmetry parameter $(I - I_0)$ where I_0 refers

CHAPITRE IV

RÉSONANCES GÉANTES ÉLECTRIQUES

L'étude des résonances géantes a suscité au cours des dernières années un intérêt croissant. Outre la résonance dipolaire, dont la systématique, commencée à la fin des années 40 par des expériences de photo-absorption, est bien connue à l'heure actuelle, et la résonance quadrupolaire (depuis les années 70) obtenue par réactions hadroniques, la systématique de la résonance monopolaire isoscalaire est maintenant connue dans une cinquantaine de noyaux (par réactions (dd'),(pp'),($\alpha\alpha'$),(^{3}He,^{3}He')) et des modes de multipolarité plus élevée commencent à être étudiés.

Du point de vue théorique, une grande variété de méthodes est utilisée : depuis la méthode HF dépend du temps (TDHF) jusqu'aux modèles hydrodynamiques. La RPA, qui représente un cas limite de TDHF, s'est montré un outil puissant dans l'étude des résonances, ainsi que les règles de somme RPA, particulièrement adaptées à la description des modes collectifs. Le calcul de quelques moments de la fonction d'intensité suffit alors pour la caractériser et pour effectuer des comparaisons significatives avec les données expérimentales. Le fait qu'elles puissent être calculées à partir d'une transformation d'échelle (scaling) de l'état fondamental HF [BLM 79] permet d'opérer la jonction avec l'approche hydrodynamique, pourvu que l'on traite correctement deux questions importantes.

1) La première concerne l'utilisation de la fonctionnelle $\tau(\rho)$ dans des calculs dynamiques. Cette fonctionnelle est construite dans un contexte statique où l'on suppose que la surface de Fermi est sphérique. Cette approximation, justifiée au centre du noyau, est moins bonne à la surface et les termes d'inhomogénéité tiennent en partie compte de la déformation de la surface de Fermi dans cette région. Dans un problème dynamique, il y a en général déformation de la surface de Fermi *dans le volume du noyau* et cela donne naissance à une force de rappel que la fonctionnelle $\tau(\rho)$ statique ne pourra décrire (il suffit pour s'en convaincre de considérer une transformation qui, tout en conservant le volume, produit une déformation de la surface de Fermi, comme par exemple un scaling quadrupolaire [SH 78, Je 80]. G. Holzwarth et G. Eckart [HE 78] ont proposé une méthode pour tenir compte de cet effet et pour l'incorporer dans

la construction de la fonctionnelle d'énergie cinétique dynamique. S. Stringari utilise une méthode équivalente à partir du scaling généralisé [BLM-75] . Il se trouve néanmoins que ces déformations de la surface de Fermi sont nulles ou négligeables dans le mode monopolaire et dans le mode dipolaire, et que par conséquent *pour ces modes* on peut utiliser la fonctionnelle statique.

Donnons l'exemple de la résonance monopolaire isoscalaire. A partir de la fonction d'intensité correspondant à l'opérateur d'excitation Q (ici $Q = \sum_i r_i^2$)

$$S(E) = \sum_n |\langle n|Q|0\rangle|^2 \, \delta(E - E_n)$$

où $|0\rangle$ et $|n\rangle$ représentent le fondamental et les états excités RPA, on définit les moments

$$m_k(Q) = \sum_n E_n^k \, |\langle n|Q|0\rangle|^2$$

(on utilise ici les notations de la réf.[BLM-77] reprises dans la réf.[6]). Nous serons intéressés au calcul de 3 règles de somme : m_{-1}, m_1, m_3 . On sait que la polarisabilité m_{-1} peut être calculée à partir d'un calcul *statique* contraint et que m_1 est proportionnel au rayon carré moyen. Ces deux quantités peuvent donc être obtenues par un calcul ITF ou MTF. On sait également que m_3 peut être obtenu par une transformation d'échelle monopolaire sur les fonctions d'ondes

$$\phi_i(r) \longrightarrow \alpha^{3/2} \phi_i(\alpha r)$$

Dans une telle transformation, la transformée de Wigner de la matrice densité à 1 corps non diagonale :

$$f(\vec{R}, \vec{p}) = \int e^{i \vec{p} \vec{s}} \, \rho\left(\vec{R} + \frac{\vec{s}}{2}, \vec{R} - \frac{\vec{s}}{2}\right) d\vec{s}$$

se transforme suivant la loi :

$$f(\vec{R}, \vec{p}) \longrightarrow f_\alpha(\vec{R}, \vec{p}) = f(\alpha \vec{R}, \frac{\vec{p}}{\alpha})$$

c'est-à-dire conserve les mêmes symétries que $f(\vec{R}, \vec{p})$.

Il en est de même dans le cas de la résonance dipolaire si on utilise le modèle de Goldhaber-Teller : le champ de vitesse , constant et parallèle à Oz ne produit qu'un déplacement d'ensemble, sans déformation, de la surface de Fermi des protons et des neutrons (en fait, les forces d'échange neutron-proton produisent une certaine déformation de la surface de Fermi, mais cet effet peut être considéré comme négligeable).

Dans les autres cas -et notamment dans le cas quadrupolaire- le volume est conservé au cours du mouvement, donc la fonctionnelle semi-classique ne donnera naissance à aucune force de rappel. Celle-ci a son origine dans la déformation de la surface de Fermi.

Une façon possible de contourner la difficulté discutée ici concernant l'utilisation dynamique de la fonctionnelle $\mathcal{T}(\rho)$ statique repose sur la remarque suivante : le calcul de $m_1(Q)$ ou de $m_3(Q)$ peut s'obtenir par un calcul statique contraint. En effet, on a les identités :

$$m_{-1}([H,Q]) = m_1(Q)$$

$$m_{-1}([H,[H,Q]]) = m_1([H,Q]) = m_3(Q)$$

Dans un calcul statique, même déformé, la fonctionnelle statique est utilisable. Les déformations éventuelles dans l'espace $\vec{p}$ dues à l'opérateur d'excitation Q apparaîtraient ici explicitement au niveau des commutateurs. Le calcul approché semi-classique des moments RPA serait donc possible pour d'autres modes que ceux étudiés ici, à l'aide d'un programme de calcul ETF déformé contraint.

2) La seconde question concerne les modes isovectoriels. Dans ces modes, il convient de tenir compte des forces d'échange : il est clair en effet que l'expression classique de l'énergie cinétique doit être modifiée pour tenir compte de la variation de vitesse s'opérant sans déplacement de matière lors de l'échange neutron-proton.

L'originalité de l'approche utilisée dans la réf.[5] concernant le traitement hydrodynamique des modes isovectoriels tient justement à la façon d'incorporer ces effets d'échange. Partant des équations TDHF, il est possible de dériver des équations de continuité et, moyennant certaines approximations, des équations du mouvement de type hydrodynamique. Les équations de continuité contiennent un terme source provenant de l'échange neutron-proton. Il y a conservation locale de la masse mais pas, séparément, conservation locale des neutrons et des protons. Au lieu de chercher à résoudre ces équations pour déterminer les énergies de vibration, ce qui conduit à des calculs compliqués et peu transparents [BS-76] , il est possible de construire un hamiltonien et un lagrangien classiques qui conduisent, à partir d'un principe variationnel classique et en utilisant les équations de continuité comme contraintes, aux mêmes équations du mouvement. Cet hamiltonien contient un terme d'énergie cinétique modifié, dont l'expression est très simple dans le cas d'une force de type Skyrme. A partir de là des expressions compactes peuvent être obtenues pour les énergies des modes monopolaires et dipolaires.

IV.1 La Résonance Monopolaire Isoscalaire et l'Incompressibilité Nucléaire

La Réf.[6] présente une analyse systématique de l'ensemble des données expérimentales concernant la résonance monopolaire isoscalaire. On étudie notamment les conditions d'extrapolation des noyaux finis à la matière nucléaire infinie et la possibilité de déterminer directement les coefficients du développement leptodermique de l'incompressibilité. Nous ne reviendrons pas ici sur cette étude, sinon pour en rappeler les principales conclusions.

Malgré l'augmentation notable de la statistique expérimentale, puisque la résonance monopolaire isoscalaire est maintenant identifiée dans

une cinquantaine de noyaux, la détermination par ajustement direct des coefficients du développement leptodermique

$$K_A = K_{nm} + K_s A^{-1/3} + K_\delta \left(\frac{N-Z}{A}\right)^2 + K_{Coul} \frac{Z^2}{A^{4/3}} \qquad \text{(IV-1)}$$

est très imprécise et les différents ensembles de mesures (Grenoble, Texas A & M, Oak Ridge et Orsay) conduisent à un éventail très large de résultats (notons qu'en ce qui concerne les masses des noyaux, bien que la précision soit de l'ordre de 10^{-5} et la statistique de l'ordre de 2000, certains coefficients de la formule de masse demeurent mal déterminés). Une difficulté importante dans la détermination expérimentale des moments de la fonction d'intensité tient à ce que le pourcentage de règle de somme mesuré, de l'ordre de 100 % dans les noyaux lourds, tombe à quelques pour cents dans les noyaux légers. Ceci entraîne une sous-estimation progressive des moments d'ordre positif et par suite une erreur systématique dans la détermination des coefficients de l'équation (IV-1): K_s est surestimé (en valeur absolue) et par conséquent K_{nm} également. D'autre part Jennings et Jackson [JJ-80] ont récemment montré qu'il y avait quelque ambiguité dans l'interprétation théorique des coefficients du développement leptodermique de K_A dans la mesure où les différents moments de la fonction d'intensité, calculés avec l'opérateur $Q = \sum_i r_i^2$, n'ont pas la même limite asymptotique. Une étude détaillée de différents moments de la fonction de distribution montre que seul le modèle du "scaling monopolaire" permet une extrapolation des incompressibilités dans les noyaux réels jusqu'à la matière nucléaire : on peut en effet montrer que son développement leptodermique est rapidement convergent -contrairement par exemple au modèle du noyau contraint.
Le modèle permet également de pallier l'erreur systématique mentionnée plus haut : une étude détaillée des différents coefficients de (IV-1) obtenus à partir d'interactions effectives ayant des caractéristiques de compressibilité très variées montre que le terme K_{coul} peut être évalué à partir de K_{nm} , que $K_s \simeq -K_{nm}$ et que $K_\delta \simeq$ - 300 MeV (la contribution de ce dernier terme est petite et K_δ dépend peu de l'interaction). L'analyse des données expérimentales à l'aide de l'expression suivante :

$$K_A = K_{nm} + \alpha K_{nm} A^{-1/3} + K_\delta \left(\frac{N-Z}{A}\right)^2 - \frac{3}{5}\frac{Z^2 e^2}{A^{4/3}}\left(12.5 - \frac{1245}{K_{nm}}\right) \qquad \text{(IV-2)}$$

conduit à une valeur $K_{nm} \simeq$ (220 ± 20 MeV), la barre d'erreur correspondant à la fois aux incertitudes expérimentales et à la dispersion

-maintenant remarquablement faible- des résultats obtenus à partir des différents ensembles de données.

IV.2 Les Modes Isovectoriels Monopolaire et Dipolaire et l'Energie de Symétrie

Il est clair que c'est l'énergie de symétrie qui génère la force de rappel dans les modes isovectoriels. On conçoit cependant que le rôle respectif de l'énergie de symétrie de volume et l'énergie de symétrie de surface soit notablement différents dans la résonance monopolaire isovectorielle et dans la résonance dipolaire. La première est en effet essentiellement un mode de volume (malheureusement non identifié expérimentalement) alors que la seconde est principalement un mode de surface.

Ces caractéristiques sont grossières : on remarque déjà dans la réf.[5] que la résonance monopolaire isovectorielle (de même d'ailleurs que la résonance monopolaire isocalaire, cf. réf.[6]) n'a pas, à cause des effets de surface, de dépendance pure en $A^{-1/3}$ et on calcule ici, plus loin, ces effets. Concernant la résonance dipolaire, l'analyse des densités de transition RPA [BT-74],[B-78] semble indiquer que la partie haute du spectre de la résonance est plutôt de nature Goldhaber-Teller (GT 48), i.e. une vibration de surface, et la partie basse du spectre de nature Steinwedel-Jensens (SJ-50) i.e. une vibration de volume. L'analyse macroscopique du rapport de la composante SJ à la composante GT est faite dans la réf.[Myers-77] * : on trouve que la composante GT est dominante dans les noyaux légers et moyens et que le rapport des composantes GT/ST tend vers 1 dans les noyaux lourds. Il nous semble cependant que la méthode utilisée n'est pas la mieux à même d'opérer la liaison avec l'approche microscopique. Là encore, l'évaluation semi-classique de certaines règles de somme paraît être la technique appropriée. Bien que, en raison des forces d'échange, on ne puisse plus calculer m_3-RPA à l'aide d'une simple transformation d'échelle sur les fonctions d'onde statiques, on peut penser qu'une telle transformation est une image raisonnable. La comparaison numérique avec les résultats de la réf.[GCR-80] confirment d'ailleurs cette hypothèse (voir tableau ci-dessous).

---

* où les auteurs introduisent un paramètre de mélange déterminé par une condition de minimisation.

Par conséquent, ce que l'on calcule dans la réf.[5] en prenant un champ de vitesse correspondant au mode GT doit se comparer à la règle de somme RPA cubique en énergie, calculée avec l'opérateur dipolaire $Q = \sum_i r_i \tau_3^i$, où τ_3^i représente la composante suivant Oz de l'isospin du nucléon i.

Il faudrait alors effectuer un calcul semi-classique de la polarisabilité dipolaire en imposant une contrainte sur le noyau et étudier la densité de transition correspondante. On verrait probablement qu'elle affecte non seulement la surface mais également le volume, c'est-à-dire qu'elle correspond plus au modèle SJ. Un tel calcul nécessite cependant l'élaboration d'un programme ETF-déformé dont nous ne disposons pas à l'heure actuelle. Pour autant, les conclusions que nous tirons plus loin concernant les énergies de symétrie nous paraissent fiables dans la mesure où l'opérateur dipolaire est très collectif : les principales règles de somme (m_{-1}, m_1, m_3) sont alors voisines.

	Monopole Isovecteur	
	[GCR-80]	réf.[5]
^{16}O	40.6	43.9
^{40}Ca	38.6	39.8
^{90}Zr	35.8	35.3
^{208}Pb	30.5	30.5

Nous allons maintenant préciser, au moyen du développement leptodermique, l'information que l'on peut retirer de l'étude de la résonance dipolaire (modèle GT) sur l'énergie de symétrie de surface. Cette discussion est amorcée dans la réf.[5] où l'on remarquait que la position de la résonance était moins sensible à la valeur de l'énergie de symétrie à la saturation ε_δ^v qu'à la valeur de l'énergie de symétrie de volume à une densité de l'ordre de $\rho_{nm}/2$ ou $\rho_{nm}/3$. Cela suggère que l'énergie de symétrie de surface est en cause, et nous avons vu au chapitre II qu'effectivement l'interaction SkM, construite en incorporant l'information fournie par la résonance dipolaire, conduit à un rapport $|\varepsilon_\delta^s / \varepsilon_\delta^v| \simeq 1.$ (au lieu de 1.3 pour S-III) en meilleur accord avec les récentes formules de masse [KNS-79] (cf. section II.1.3).

Dans un article récent, Lipparini et Stringari [LS-81] concluent, à partir également de l'étude de la résonance dipolaire, qu'un bon accord avec l'expérience (en utilisant notamment la règle de somme RPA

cubique en énergie) impose une valeur $\left|\varepsilon_1^s / \varepsilon_\delta^v\right| \simeq 1$. Il est donc intéressant -et utile- de localiser le désaccord.

Nous allons montrer, à partir de l'évaluation analytique semi-classique de l'énergie de résonance, que :

i) celle-ci est insensible aux termes gradients (de la fonctionnelle) qui contribuent à la détermination de l'énergie de symétrie de surface

ii) la position de la résonance n'est sensible qu'à la contribution à l'énergie de symétrie de surface, du potentiel de symétrie de volume $\mathcal{E}_\delta(\rho)$

iii) l'approximation de proportionnalité des densités de neutrons et de protons est en conséquence bonne concernant le calcul de la force de rappel.

Or on a vu (cf. la remarque de la section II.1) que les termes gradients de la fonctionnelle de Skyrme contribuaient *pour moitié* à la détermination de l'énergie de symétrie de surface et que par conséquent l'approximation de proportionnalité des densités était mauvaise pour le calcul de cette grandeur.

Il nous semble que là est l'origine du désaccord, d'un facteur justement proche de 2, relatif à la valeur du rapport

La façon la plus simple de mettre ceci en évidence est de constater que l'approximation $\rho_n = \frac{N}{A}\rho$ et $\rho_p = \frac{Z}{A}\rho$ conduit effectivement à :

$\frac{\varepsilon_\delta^s}{\varepsilon_\delta^v} \simeq -1$ pour SkM au lieu de -1.6

$\frac{\varepsilon_\delta^s}{\varepsilon_\delta^v} \simeq -0.6$ pour S-III au lieu de -1.3

(cf. remarque de la Section II.1.3).

Le chiffre obtenu pour SkM, qui a été construite en partie pour reproduire la résonance dipolaire, correspond bien à la conclusion tirée dans la réf.[LS-81].

D'autre part, l'énergie de la résonance s'écrit, *en supposant* $\rho_n = \rho_p$ dans l'expression de la force de rappel (cf. eq. 3.20 de la réf.[6]) :

$$(\hbar\omega)_{AV} = \left[\frac{\hbar^2}{m} \frac{2}{3} r_0^2 \frac{\int \left[\frac{\rho'}{\rho}(1+2\chi\rho)\right]^2 \rho\, E_\delta(\rho,\rho')\, d\vec{r}}{D_{AV}} \right]^{1/2} \qquad \text{(IV-3)}$$

$$D_{AV} = \frac{4NZ}{A^2} A r_0^2 (1 + \chi_{AV}) \qquad \text{(IV-3a)}$$

$$\chi_{AV} = \chi \frac{\int \rho^2 d\vec{r}}{A} \qquad \text{(IV-3b)}$$

$$\chi = \frac{m}{2\hbar^2}\left[t_1\left(1+\frac{x_1}{2}\right) + t_2\left(1+\frac{x_2}{2}\right)\right] \qquad \text{(IV-3c)}$$

On peut aussi écrire (cf. éqs.(82) et (84)) :

$$\rho E_\delta(\rho,\rho') = \rho\, \varepsilon_\delta(\rho) + \epsilon \rho'^2 \qquad \text{(IV-4)}$$

$$\varepsilon_\delta(\rho) = \varepsilon_\delta^v + \frac{L}{3}\frac{\delta\rho}{\rho_{nm}} + \frac{K_{sym}}{18}\left(\frac{\delta\rho}{\rho_{nm}}\right)^2 = \varepsilon_0 + \varepsilon_1\rho + \varepsilon_2\rho^2 \qquad \text{(IV-4a)}$$

$$\varepsilon_0 = \varepsilon_\delta^v - \frac{L}{3} + \frac{K_{sym}}{18} \qquad \text{(IV-4b)}$$

$$\varepsilon_1 = \frac{1}{3\rho_{nm}}\left(L - \frac{K_{sym}}{3}\right) \qquad \text{(IV-4c)}$$

$$\varepsilon_2 = \frac{K_{sym}}{18\rho_{nm}^2} \qquad \text{(IV-4d)}$$

On obtient alors, en utilisant la relation

$$\int_{-\infty}^{+\infty} f^n (f-1)^2 dx = \frac{t}{n(n+1)} \qquad \left(f = \frac{1}{1+\exp\frac{x}{t}} \right)$$

et en représentant la densité de matière par une distribution de (Fermi)[1] :

$$(\hbar\omega)_{AV} = \left[\frac{\hbar^2}{m} \frac{C}{1+\chi\rho_{nm}} \frac{1}{t_m r_0}\right] A^{-1/6}\left(1 + \frac{C'}{2C} A^{-1/3}\right)$$

(IV-5)

avec

$$C = \varepsilon_\delta^v \left[1 + \frac{4}{3}\chi\rho_{nm}\left(1+\frac{\chi\rho_{nm}}{2}\right)\right] - \frac{2L}{9}\left[1+\chi\rho_{nm}\left(1+\frac{2}{5}\chi\rho_{nm}\right)\right] + \frac{K_{sym}}{36}\left[1+\frac{4}{5}\chi\rho_{nm}\left(1+\frac{1}{2}\chi\rho_{nm}\right)\right.$$
$$\left. + \frac{\epsilon}{10}\frac{\rho_{nm}}{t_m}\left[1+\frac{4}{3}\chi\rho_{nm}\left(1+\frac{3}{7}\chi\rho_{nm}\right)\right]\right. \qquad \text{(IV-6)}$$

$$C' = 4\frac{\varepsilon_s}{K}\left\{2\chi\rho_{nm}(1+\chi\rho_{nm})\varepsilon_\delta^v + \frac{L}{6}\left(1-\frac{6}{15}\chi^2\rho_{nm}^2\right) - \frac{K_{sym}}{36}\left(1+\frac{2}{5}\chi\rho_{nm}\right)\right.$$
$$\left. + \frac{3\epsilon}{20}\frac{\rho_{nm}}{t_m}\left[1+\frac{8}{5}\chi\rho_{nm}\left(1+\frac{3}{7}\chi\rho_{nm}\right)\right] - \frac{\chi\rho_{nm}}{1+\chi\rho_{nm}} + \frac{1}{3}\right\} + \frac{2t_m}{r_0}\frac{\chi\rho_{nm}}{1+\chi\rho_{nm}} \qquad \text{(IV-7)}$$

Dans l'éq.(IV-5), la dépendance en $A^{-1/6}$ traduit le fait que le mode GT est un mode de vibration de surface. La correction en $A^{-1/3}$ provient de la prise en compte de la variation de la densité au centre du noyau avec le nombre de masse A. On vérifie que le terme en ϵ dans C et C' est de l'ordre du % du total.

Pour les interactions SkM et S-III, on compare dans le tableau ci-dessous les valeurs calculées de façon complètement self-consistante (approximation MTF, ref.[5]) et celles données par l'éq.(IV-5), soit :

$$(\hbar\omega)_{1v} = 35.17\ A^{-1/6}\left(1 + 0.262\ A^{-1/3}\right) \quad \text{pour S-III} \quad (t_m(\text{MTF}) = 0.6$$
$$(\hbar\omega)_{1v} = 32.07\ A^{-1/6}\left(1 + 0.396\ A^{-1/3}\right) \quad \text{pour SkM} \quad (t_m(\text{MTF}) = 0.7$$

On donne également, entre parenthèses, les valeurs obtenues sans tenir compte de la correction en $A^{-1/3}$.

	SkM		S-III	
	réf.5	eq.(IV-5)	réf.5	eq.(IV-5)
^{16}O	22.7	23.4 (20.2)	25.4	24.5 (22.2)
^{40}Ca	19.8	19.4 (17.3)	21.5	20.5 (19.0)
^{90}Zr	16.7	16.5 (15.1)	18.3	18.1 (16.6)
^{208}Pb	13.8	14.0 (13.2)	15.3	15.3 (14.4)

Remarquons que la valeur de $(\hbar\omega)_{1v}$ est sensible à celle de la diffusivité (cf. eq.(IV-5)). Nous avons utilisé la valeur calculée à partir de l'épaisseur de surface (1/10-9/10) de la courbe d'équation (9.a), sect. II.1.1, obtenue à l'approximation MTF (c'est l'approximation utilisée dans la réf.[5]).

Quelle que soit l'approximation utilisée, l'équation (IV-5) donnera toujours la réponse qualitativement correcte concernant l'effet d'une modification des propriétés de symétrie de l'interaction effective sur la position de la résonance.

Notre conclusion est donc la suivante : si l'on identifie le pic expérimental de la résonance dipolaire avec le rapport $\sqrt{\frac{m_3}{m_1}}$, i.e. avec le modèle de Goldhaber-Teller, l'approche hydrodynamique établit une corrélation assez précise entre ε_δ^v et ε_δ^s ; cette corrélation apparaît, dans les équations (IV.5), (IV.6) et (IV.7), comme une relation entre ε_δ^v et L (et par conséquent K_{sym} , cf. éq.(I-22)); ce qui est en jeu *directement*, c'est l'*ensemble* de la courbe $\varepsilon_\delta(\rho)$, d'où, par le théorème d'équipartition de l'énergie de surface entre les termes de volume et les termes en gradient de la fonctionnelle (sect.II.1), on peut en déduire la relation entre ε_δ^v et ε_δ^s . Néanmoins si l'on met en regard l'ensemble des situations où les propriétés de symétrie sont en jeu, on peut arriver à une estimation séparée de ε_δ^v et ε_δ^s qui rejoint celle des formules de masse.

L'interaction SkM, construite en partie à partir de cette analyse, conduit à une valeur du rapport $|\varepsilon_\delta^s / \varepsilon_\delta^v| \simeq 1.6$, pour une valeur $\varepsilon_\delta^v = 30.7$ MeV. Nous avons vu que SkM avait une énergie de surface trop faible, $\varepsilon_s = 17.7$. Si l'on croit aux valeurs des formules de masse $\varepsilon_s \sim 20$ MeV, il faut augmenter ε_s(SkM) de ~ 2 MeV. Mais pour conserver une valeur relativement basse de l'énergie de surface effective $\tilde{\varepsilon}_s = \varepsilon_s + \varepsilon_\delta^s I^2$ ($I = \frac{N-Z}{A}$), il faut donc augmenter, en valeur absolue, ε_δ^s, d'une quantité $\Delta\varepsilon_\delta^s$ qu'on peut évaluer par exemple en considérant le ^{240}Pu, où I = 0.217 :

$$\Delta\varepsilon_\delta^s \simeq \frac{2}{(0.217)^2} = -42 \text{ MeV}$$

D'où au total (puisque ε_δ^s (SkM) = - 50 MeV) :

$$\varepsilon_\delta^s \simeq -90 \text{ MeV}$$

Comme la quantité d'énergie d'asymétrie totale $\varepsilon_\delta^v + \varepsilon_\delta^s A^{-1/3}$ doit demeurer fixe, on trouve que ε_δ^v doit augmenter de :

$$\Delta\varepsilon_\delta^v = 42(240)^{1/3} \simeq 7 \text{ MeV}$$

d'où

$$\varepsilon_\delta^v = 30.7 + 7 \simeq 38 \text{ MeV}$$

On voit que l'ensemble des propriétés considérées conduisent finalement à l'estimation :

$$\varepsilon_\delta^v \simeq 37\text{-}38 \text{ MeV}$$

$$\varepsilon_\delta^s \simeq -90 \text{ MeV}$$

CONCLUSION

Nous pensons avoir contribué à montrer, dans la présente thèse, que le formalisme de densité d'énergie (EDF) était un outil permettant d'atteindre avec finesse les propriétés nucléaires moyennes statiques, à température nulle et à température finie, et certaines propriétés dynamiques. La self-consistance de la procédure et l'utilisation d'un cadre théorique commun pour le cas statique comme pour le cas dynamique sont les principales qualités de la méthode : elles assurent en effet la cohérence des différents résultats obtenus. Le formalisme EDF est ici construit en utilisant pour la partie cinétique la fonctionnelle de Thomas-Fermi étendue aux corrections d'inhomogénéité [ETF] et pour la partie potentielle des interactions de portée nulle de type Skyrme. Le Développement de la Matrice Densité (DME) justifie l'utilisation de telles interactions effectives schématiques, tout en mettant cependant en évidence une de leurs limites actuelles : le mécanisme de saturation dans la matière nucléaire des forces de Skyrme est, par construction, très différent de celui d'une interaction effective déduite d'une force à 2 corps réaliste ; la DME permet de localiser le désaccord dans la structure des termes dépendant des vitesses de la force de Skyrme, dont on a vu qu'il ne faudrait en réalité pas négliger la dépendance en densité. L'influence de cet effet sur les propriétés de spin de l'interaction est une question qui reste à étudier.

Une des difficultés -et un des attraits- de la description semi-classique des noyaux tient à leur *taille* : les noyaux sont des systèmes *petits* (le rapport de l'épaisseur de surface au rayon va de ~ 1 dans l'oxygène à ~ 0.3 dans un noyau lourd) et les effets de surface sont toujours importants. Bien que l'approximation de Thomas-Fermi (TF) ne soit pas bien adaptée à la description de la surface, nous avons montré que son extension ETF aux termes d'inhomogénéité permettait d'avoir une bonne description qualitative -toujours- et quantitative -parfois- des propriétés moyennes de la surface : profil des densités, tension superficielle et épaisseurs de surface (dans le cas $N = Z$ et dans le cas $N \neq Z$). Pour l'étude *quantitative* des situations où les propriétés

géométriques de la surface étaient importantes, nous avons construit une fonctionnelle phénoménologique (MTF) ajustée sur les résultats obtenus par la méthode de HF dans les systèmes sphériques. Nous avons montré que la prise en compte des degrés de liberté propres à la surface nucléaire marquait une limite à l'approche purement macroscopique qui traite les propriétés géométriques de la surface de façon perturbative. On a montré en particulier que là résidait l'origine du désaccord entre la méthode HF et l'approche macroscopique concernant la détermination de la densité d'équilibre de la matière nucléaire. Le formalisme EDF, dans lequel les différentes grandeurs physiques peuvent s'exprimer comme fonctionnelles des densités de matière, est un moyen particulièrement apte à opérer le lien entre l'interaction effective et le modèle de la Goutte liquide. L'utilisation du Développement leptodermique, d'où se déduisent les développements des propriétés nucléaires moyennes en $A^{-1/3}$ et en asymétrie $I = \frac{N-Z}{A}$, permet une *détermination variationnelle* de l'ensemble des coefficients de la Goutte liquide à partir des paramètres de la force, s'exprimant souvent sous forme d'expressions analytiques simples. On obtient ainsi un contrôle satisfaisant des propriétés de l'interaction effective et une méthode pour *aider à construire des forces utilisables dans des calculs microscopiques et incorporant une plus grande information expérimentale.*

L'analyse des propriétés statiques et l'extension du formalisme à température finie et à la description des résonances géantes (monopolaire et dipolaire) nous a ainsi permis d'atteindre les caractéristiques suivantes de l'interaction : l'incompressibilité nucléaire, la dépendance en densité de l'énergie de symétrie (d'où le rapport entre énergie de symétrie de volume et énergie de symétrie de surface peut être extrait), la dépendance en densité de la masse effective et la dépendance en température des principaux coefficients de la formule de masse.
La transparence du formalisme EDF et son traitement self-consistant ont permis d'apporter une réponse à certaines ambiguités récemment soulignées concernant la résonance monopolaire isoscalaire en liaison avec l'étude de l'incompressibilité nucléaire. Là encore l'approche purement macroscopique trouve ses limites tandis que l'étude complètement microscopique (RPA) voile parfois les déterminants principaux des résultats obtenus par une description trop détaillée. L'évaluation semi-classique de certaines règles de somme a été ici la technique la mieux adaptée.

La prise en compte dans le modèle hydrodynamique de l'effet des forces d'échange sur la détermination du paramètre de masse collectif nous a permis d'étudier la résonance dipolaire en liaison avec les propriétés de symétrie de l'interaction. Les effets de symétrie de surface ont pu être mis en évidence, et précisés dans les chapitres précédents de façon plus quantitative. En incorporant l'information concernant l'incompressibilité et l'énergie de symétrie, on a pu construire, à titre d'illustration, une interaction effective qui a depuis été utilisée dans des calculs HF et semi-classiques de barrières de fission ; les barrières, trouvées systématiquement trop élevées avec les interactions précédemment utilisées, se comparent bien mieux avec les barrières expérimentales ; ceci confirme qu'on a amélioré sensiblement, par la considération de la résonance dipolaire, les propriétés de symétrie de la force ; on a ainsi une meilleure détermination de l'énergie de surface effective qui gouverne principalement la hauteur des barrières. (Un travail prolongeant et élargissant cette première tentative est actuellement en cours.) La même conclusion peut être tirée du fait que cette interaction reproduit bien les rayons de charges expérimentaux du ^{40}Ca et du ^{48}Ca. Une étude systématique des effets d'asymétrie dans les résonances géantes préciserait certainement les résultats obtenus. L'examen de leur incidence sur le calcul des différences de rayon de neutrons et de protons dans les noyaux serait un prolongement naturel de ce travail.

Bien qu'on n'ait analysé ici que des modes pour lesquels les déformations de la surface de Fermi pouvaient être négligés, ce qui est une condition nécessaire pour l'utilisation des fonctionnelles d'énergie cinétique semi-classiques, l'extension aux autres multipoles est en principe possible : cela suppose l'élaboration -envisagée- d'un programme de calcul TF pour des systèmes déformés sous contrainte. On aurait ainsi une méthode simple d'évaluation des principales règles de somme RPA.

Enfin un prolongement de l'étude des propriétés moyennes d'excitation consisterait à modifier la paramétrisation de Skyrme concernant la masse effective, de façon à incorporer l'effet de dépendance en énergie qui augmente sa valeur au voisinage de la mer de Fermi. Bien

qu'il s'agisse là d'un effet au-delà de l'approximation HF, il est dans la logique de la construction d'interactions effectives d'incorporer le maximum d'informations expérimentales. Plusieurs objectifs pourraient ainsi être atteints, en conservant la même simplicité formelle des forces de portée nulle. D'une part on améliorerait la densité de niveaux à une particule et par conséquent les propriétés à température finie notamment en vue d'applications astrophysiques. Mais il serait peut-être possible du même coup d'obtenir des courbes de saturation par sous-espace (S,T) en meilleur accord avec les résultats des interactions effectives réalistes : les mêmes paramètres de l'interaction gouvernent en effet les 2 effets.

Il convient, pour terminer cette conclusion, de mentionner plusieurs questions ouvertes : quels liens existent entre la formulation hydrodynamique des équations de TDHF et l'hamiltonien hydrodynamique semi-classique, dont nous nous sommes servis pour la description des résonances géantes ? Peut-on envisager d'élaborer une formulation semi-classique praticable pour les mouvements de *grande amplitude* et non plus seulement autour de l'équilibre ? Comment tenir alors compte des déformations de la surface de Fermi ? Une formulation semi-classique de la dissipation est-elle envisageable ?...

Dans le présent travail, on a surtout cherché à mettre en évidence les relations entre propriétés microscopiques et macroscopiques. On a souvent disposé, comme garde-fou, de la comparaison aux calculs microscopiques déjà existants. Dans les problèmes complexes mentionnés ci-dessus, il semble que l'utilisation de l'approche semi-classique sera une condition pour obtenir des résultats pratiques tout en évitant des calculs microscopiques par trop prohibitifs.

Work in this direction is not yet in progress, but should be in the next future.

REFERENCES

[B-78] V. Bernard, Thèse 3è Cycle (1978) Orsay.

[BBJL-69] K.A. Brueckner, J.R. Buchler, S. Jorna et R.J. Lombard, Phys. Rev. 171 (1968) 1188.

[BB-81] M. Barranco et J.R. Buchler, Ap.J. Lett. (1981) in press.

[BB-81] M. Barranco et J.R. Buchler, University of Florida, preprint 81-5.

[Be-36] H.A. Bethe, Phys. Rev. 50 (1936) 332.

[Be-68] H.A. Bethe, Phys. Rev. 167 (1968) 166.

[BFNQ-75] M. Beiner, H. Flocard, Nguyen Van Giai et P. Quentin, Nucl. Phys. A238 (1975) 29.

[BG-81] J.P. Blaizot et B. Grammaticos, Nucl. Phys. A355 (1981) 115.

[BGG-76] J.P. Blaizot, D. Gogny et B. Grammaticos, Nucl. Phys. A265 (1976) 315.

[BGW-58] K.A. Brueckner, J.L. Gammel et H. Weitzner, Phys. Rev. 110 (1958) 431.

[BGHMS-81] M. Brack, C. Guet, H.B. Hakansson, A. Magner, et V.M. Strutinsky, Regensburg preprint.

[Bl -80] J.P. Blaizot, Phys. Rep. 64 (1980) 171.

[BLM-79] O. Bohigas, A.M. Lane et J. Martorell, Phys. Rep. 51 (1979) 267.

[BQ-75] M. Brack et P. Quentin, Phys. Lett. 56B (1975) 421.

[BQ-80] M. Brack et P. Quentin, Nucl. Phys. A361 (1981) 35.

[BR-71] R.L. Badhuri et C.K. Ross, Phys. Rev. Lett. 27 (1971) 606.

[BS-76] G. Bertsch et K. Stricker, Phys. Rev. C13 (1976) 1312.

[BT-74] G. Bertsch et S.F. Tsai, Phys. Lett. 50B (1974) 319.

[Bu-80] M. Buenerd et al.

[BV-80] P. Bonche et D. Vautherin,
IPNO/TH 80-66, Orsay.

[BWi-56] R.A. Berg, L. Wilets,
Phys. Rev. 101 (1956) 201.

[C-77] J. Côté,
Thèse, Université de Montréal (1977).

[Ca-72] X. Campi,
Thèse d'Etat, Orsay (1972).

[CB-78] X. Campi et A. Bouyssy,
Phys. Lett. B73 (1978) 263.

[CJB-77] Y.H. Chu, B.K. Jennings et M. Brack,
Phys. Lett. 68B (1977) 407.

[CP-78] J. Côté et J.M. Pearson,
Nucl. Phys. A304 (1978) 104.

[CS-80] X. Campi et S. Stringari,
Nucl. Phys. A337 (1980) 313.

[CSp-72] X. Campi et D.W. Sprung,
Nucl. Phys. A194 (1972) 401.

[FCP-80] M. Farine, J. Côté et J.M. Pearson,
Nucl. Phys. A338 (1980) 86.

[FCP-81] M. Farine, J. Côté et J.M. Pearson,
to be published in Phys. Lett.

[FQVVK-74] H. Flocard, P. Quentin, D. Vautherin, M. Véneroni et A.K. Kerman,
Nucl. Phys. A231 (1974) 176.

[GB-80] C. Guet et M. Brack,
Z. Phys. 297 (1980) 247.

[GC-65] A. Gilbert et A.G.W. Cameron,
Can. J. Phys. 43 (1965) 1446.

[GCR-80] K. Goeke, B. Castel et P.G. Reinhard,
ICNP, Berkeley 1980.

[GHB-80] C. Guet, H.B. Hakansson et M. Brack,
Phys. Lett. 97B (1980) 7.

[Gi-68] A. Gilbert,
University of California, Rad. Lab. Rep. UCLL-18095.

[GT-48] M. Goldhaber et E. Teller,
Phys. Rev. 74 (1948) 1046.

[GV-79] B. Grammaticos et A. Voros,
Ann. Phys. 123 (1979) 359.

[Ha-80] P. Haensel,
Phys. Lett. 81B (1979) 276.

[He-33] W. Heisenberg,
Z. Phys. 80 (1933) 587.

[He-78] G. Holzwarth et G. Eckart,
Z. Phys. A284 (1978) 291.

[HGB-81] H.B. Hakansson, C. Guet et M. Brack,
Regensburg preprint 1981.

[Hu-72] J.R. Huizenga et L.G. Moretto,
Ann. Rev. Nucl. Sci. 22 (1972) 427.

[HW-53] D.L. Hill et J.A. Wheeler,
Phys. Rev. 89 (1953) 1102.

[J-80] B.K. Jennings,
Phys. Lett. 96B (1980) 1.

[JBB-75] B.K. Jennings, R.K. Badhuri et M. Brack,
Phys. Rev. Lett. 34 (1975) 228.

[Je-76] B.K. Jennings,
Thèse, Mac Master University (1976).

[JJ-80] B.K. Jennings et J.D. Jackson,
Phys. Reports 66 (1980) 141.

[JLM-76] J.P. Jeukenne, A. Lejeune et C. Mahaux,
Phys. Rep. 25C (1976) 85.

[Ki-67] D.A. Kirzhnitzs,
Field Theoretical Methods in Many Body Problems,
Pergamon Press 1967.

[KNS-79] H.J. Krappe, J.R. Nix et A.J. Sierk,
Phys. Rev. C20 (1979) 992.

[Kö-71] H.S. Köhler,
Nucl. Phys. A162 (1971) 385 ;
Nucl. Phys. A170 (1971) 88.

[KR-80] S.J. Kataria et V.S. Ramamurthy,
Nucl. Phys. A349 (1980) 10.

[KRK-78] S.K. Kataria, V.S. Ramamurthy et S.S. Kapoor,
Phys. Rev. C18 (1978) 549.

[Lo-73] R.J. Lombard,
Ann. of Phys. 77 (1973) 380.

[LLPR-78] D.Q. Lamb, J.M. Lattimer, C.J. Pethick et D.G. Ravenhall,
Phys. Rev. Lett. 41 (1978) 1623.

[LS-81] E. Lipparini et S. Stringari,
Phys. Lett. 99B (1981) 183.

[Ma-33] E. Majorana,
Z. Phys. 80 (1933) 137.

[My-77] W.D. Myers,
Droplet Model of Atomic Nuclei, IFI (Plenum NY 77).

[MySw-69] W.D. Myers et W.J. Swiatecki,
Ann. of Phys. 55 (1969) 395.

[MySw-74] W.D. Myers et W.J. Swiatecki,
Ann. of Phys. 84 (1974) 186.

[MySw-80] W.D. Myers et W.J. Swiatecki,
Nucl. Phys. A336 (1980) 267.

[My et al. 77] W.D. Myers, W.J. Swiatecki, T. Kodama, L. El. Jaick et E. Hilf,
Phys. Rev. C15 (1977) 2032.

[MyVG-76] W.D. Myers et H. von Groote,
Phys. Lett. 61B (1976) 126.

[Ne-70] J.W. Negele,
Phys. Rev. C1 (1970) 1260.

[NP-66] P. Nozières et D. Pines,
The theory of quantum liquids, Benjamin NY, 1966.

[NV-72] J.W. Negele et D. Vautherin,
Phys. Rev. C5 (1972) 1472.

[NV-75] J.W. Negele et D. Vautherin,
Phys. Rev. C11 (1975) 1031.

[P-80] J.M. Pearson, M. Farine, J. Côté, B. Rouben et G. Saunier,
Atomic Masses and Fundamental Constants 6 (1980), Plenum Publishing Corporation, N.Y.

[Pe-79] R.E. Peierls,
Surprises in Theoretical Physics, Princeton University Press (1979).

[S et al. 78] S. Stringari et al.
Nucl. Phys. A309 (1978) 77 ; A309 (1978) 189.

[SH-78] H. Sagawa et G. Holzwarth,
Prog. Theor. Phys. 59 (1978) 1213.

[SJ-50] H. Steinwedel et H. Jensen,
Z. Natur. forsch. 5a (1950) 413.

[Sk-56] T.H.R. Skyrme,
Phil. Mag. 1 (1956) 1043.

[St-68] V.M. Strutinski,
Nucl. Phys. A122 (1968) 1.

[SVCC-75] D.W. Sprung, M. Vallieres, X. Campi et Che Ming Ko,
Nucl. Phys. A253 (1975) 1.

[SW-51] W.J. Swiatecki,
Proc. Phys. Soc. 64A (1951) 226.

[T-79] F. Tondeur,
J. Phys. G., Nucl. Phys. 5 (1979) 1189.

[Va-69] D. Vautherin,
Thèse (1969) Orsay.

[VB-70] D. Vautherin et D.M. Brink,
Phys. Lett. 32B (1970) 149.

[VB-72] D. Vautherin et D.M. Brink,
Phys. Rev. C5 (1972) 626.

[Wi-56] L. Wilets,
Phys. Rev. 101 (1956) 1805.

DEUXIEME PARTIE

J. Phys. G: Nucl. Phys., Vol. 2, No. 5, 1976. Printed in Great Britain. © 1976

A simple parametrization of the density-matrix expansion and Skyrme-like forces

J Treiner and H Krivine
Institut de Physique Nucléaire, Division de Physique Théorique†, 91406 Orsay, France

Received 15 December 1975

Abstract. The validity of the density-matrix expansion (DME) is investigated using two different interactions: the Brink and Boecker B1 force and the Campi–Sprung G-0 force. Simple parametrizations of the Hamiltonian density are discussed and the connection between the DME and Skyrme-like forces is examined.

1. Introduction

The density-matrix expansion (DME) proposed by Negele and Vautherin (1972) allows one to construct, from a two-body interaction $V(r_1, r_2)$, an effective nuclear Hamiltonian density depending on the densities ρ_n and ρ_p, their gradients $\nabla\rho_n$, $\nabla\rho_p$ and the kinetic energies densities τ_n and τ_p.

Formally one can separate this Hamiltonian density into two terms; the first one corresponds to the nuclear matter energy at the local densities and the second one, in which the gradients of the densities appear, corrects the departures of the density matrix in the nucleus from its value in nuclear matter. It has been claimed that this second term is essentially determined by the long-range behaviour of the force (Negele and Vautherin 1972, § III).

The purpose of the present paper is to further investigate the validity of the DME, and to study its connections with phenomenological forces (Moszkowski 1970, Köhler 1971a, b, Ehlers and Moszkowski 1972) such as the Skryme interaction (Beiner *et al* 1975) or semi-phenomenological Hamiltonian densities such as those derived within the energy density formalism (EDF) (Beiner and Lombard 1974).

In § 2 we compare the results obtained with the DME with those of exact Hartree–Fock (HF) calculations for two different effective forces; (i) that of Brink and Boecker (1967) modified by Vautherin and Veneroni (1969) and hereafter referred to as B1β and (ii) the density-dependent interaction G-0 of Campi and Sprung (1972).

In the framework of the DME, the functional dependence of H in $V(r_1, r_2)$ is rather involved and requires the storage of four functions of the densities. Since in the HF method we essentially need the values of these functions around saturation densities, it is reasonable to look for approximate parametrizations accurate around

† Laboratoire associé au CNRS.

saturation. For this purpose, we construct in § 3 a simple expression of the Hamiltonian density H reproducing the results of the exact DME calculations, and we compare it with the functionals obtained with the EDF (§ 4).

It is known (Vautherin and Brink 1972) that the HF energy calculated with a Skyrme interaction can be written as the integral of a simple functional (identical in this case to the DME Hamiltonian density) depending linearly on the interaction parameters. In view of the successes of this kind of interaction (Flocard *et al* 1974), it is interesting to look for both a qualitative and a quantitative derivation of these parameters.

Therefore, in § 5, we construct a Skyrme-type interaction which reproduces accurately the energies per particle, densities, mean-square radii and the single-particle spectra given by the DME with interaction G-0. We show that a density-dependent term proportional to $\rho^{1/6}$ significantly improves the agreement as compared with a linear density dependence.

2. DME calculations

2.1. Background and notation

In the DME, the angular average of the two-body density matrix $\rho(r_1, r_2)$ is expanded around the value $R = \frac{1}{2}(r_1 + r_2)$ in terms of the relative distance $r = r_1 - r_2$:

$$\frac{1}{4\pi}\int d\Omega_s \rho(R + \tfrac{1}{2}r, R - \tfrac{1}{2}r) = \frac{1}{4\pi}\int d\Omega_s \sum_m \Psi_m^*(R + \tfrac{1}{2}r)\,\Psi_m(R - \tfrac{1}{2}r)$$

$$= 3\frac{j_1(rk_F)}{rk_F}\rho(R) + 35\frac{r^2 j_3(rk_F)}{2(rk_F)^3}[\tfrac{1}{4}\nabla^2\rho(R) - \tau(R) + \tfrac{3}{5}\rho(R)\,k_F^2] + \ldots. \quad (1)$$

In this equation, $\rho(R) = \Sigma_m \Psi_m(R)^*\Psi_m(R)$ is the nuclear density and $\tau(R) = \Sigma_m \nabla\Psi_m^*(R)\nabla\Psi_m(R)$ is the kinetic energy which is equal to $\frac{3}{5}\rho k_F^2$ in nuclear matter with a Fermi momentum $k_F (k_F = (\frac{3}{2}\pi^2\rho)^{1/3})$.

This expansion, when truncated at the second term and inserted into the HF expression for the potential energy, brings the total energy into the form

$$E = \int H(R)\,d^3R \quad (2)$$

where $H(R)$ is the following functional of the densities $\rho_n(R)$ and $\rho_p(R)$:

$$H(\rho_n(R), \rho_p(R)) = \rho(R)\,(E/A)_{NM} + \sum_{i=n,p}\left(\frac{\hbar^2}{2m_i^*(R)}(\tau_i(R) - \tfrac{3}{5}\rho_i(R)\,k_i^2(R)) + C_i|\nabla\rho_i(R)^2|\right)$$

$$+ D\,\nabla\rho_n(R)\nabla\rho_p(R). \quad (3)$$

In equation (3), $(E/A)_{NM}$ represents the energy per particle in nuclear matter with densities $\rho_p = (1/3\pi^2)\,k_p^3$ and $\rho_n = (1/3\pi^2)\,k_n^3$. The functional quantities $C_n \equiv C(\rho_n, \rho_p)$, $C_p \equiv C(\rho_p, \rho_n)$, $D \equiv D(\rho_n, \rho_p)$ and $(\hbar^2/2m_i^*)\,(\rho_n, \rho_p)$ are defined by equations (3.7) to (3.10) and (4.44) of Negele and Vautherin (1972).

In symmetric nuclear matter ($\rho_n = \rho_p = \frac{1}{2}\rho$) with Fermi momentum k_f, the expression for the effective mass is, for a central force

$$\frac{\hbar^2}{2m^*} = \frac{\hbar^2}{2m} + B \tag{4}$$

where

$$B = \frac{35}{\pi k_f} \int_0^\infty \sum_E V^{2S+1,2T+1}(r)\, j_1(k_f r)\, j_3(k_f r)\, \mathrm{d}r \tag{5}$$

and

$$\sum_E V^{2S+1,2T+1}(r) = V^{11}(r) - 3V^{13}(r) - 3V^{31}(r) + 9V^{33}(r). \tag{6}$$

The labels S and T refer to spin and isospin states.

One should point out that this definition of the effective mass does not coincide with the usual one (Brown 1967) which is obtained by expanding the nuclear matter one-body potential $U(k)$ in powers of k^2:

$$U(k) = \sum_{n \leqslant k_f} \langle kn|V|kn\rangle - \langle kn|V|nk\rangle = U_0 + k^2 U_2 + \ldots. \tag{7}$$

Indeed, this expansion leads to the following effective mass:

$$\frac{\hbar^2}{2m^*} = \frac{\hbar^2}{2m} + U_2 \tag{8}$$

with

$$U_2 = \frac{k_f^2}{3\pi} \int_0^\infty \sum_E V^{2S+1,2T+1}(r)\, r^3 j_1(k_f r)\, \mathrm{d}r. \tag{9}$$

Using the constant value U_0 as potential and the effective mass given by formula (8) is certainly a good approximation around $k = 0$. However significant discrepancies appear near the Fermi level k_f as can be seen in figure 1. On the contrary, definitions (4) and (5) can be shown to yield a much better overall agreement in the range $0 \leqslant k \leqslant k_f$. Indeed we prove in appendix 1 that the effective mass B of the DME

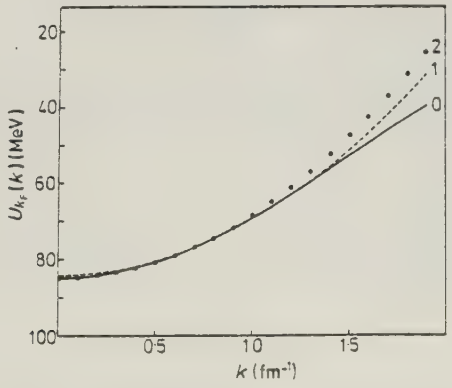


Figure 1. One-body HF potential $U(k)$ calculated with G-0 force labelled 0. Label 2 refers to the expansion of $U(k)$ around $k = 0$ up to second order. Label 1 refers to the DME expansion ($k_F = 1{\cdot}355$ fm^{-1}.)

method can be defined as the coefficient of k^2 in a second-degree polynomial minimizing the quantity

$$Q(V, B) = \int_0^{k_F} [U(k) - (V + Bk^2)]^2 P(k)\, dk$$

where

$$P(k) = \frac{3k^2}{k_f^3} \tag{10}$$

is the momentum probability density inside the Fermi sea.

2.2. Nuclear matter term

Let us now present the numerical method used in this paper to calculate the function $(E/A)_{NM}$ appearing in the functional H.

We first analyse (see appendix 2) the properties of symmetric and asymmetric nuclear matter calculated with various potentials. We then show that it is possible to construct a simple parametrization of $E/A(k_F,\alpha)$, $\alpha = (\rho_n - \rho_p)/\rho$, valid even in the region $\alpha \lesssim 1$ (the case of a neutron gas). For this parametrization, which looks like a Taylor expansion around the saturation momentum k_{F_0} of symmetric nuclear matter, we have adopted the following polynomial form:

$$E/A = k_F^2(a_0 + a_1\Delta k + a_2\Delta k^2 + a_3\Delta k^3) + \alpha^2 k_F^2(a_4 + a_5\Delta k) \tag{11}$$

where

$$\Delta k = k_F - k_{F_0}.$$

Formula (11) exhibits the expected k_F^2 dependence at low density (kinetic energy term). However the numerical values of the coefficients a_i have not been determined so as to reproduce exactly this term. Indeed we think that in the DME spirit it is more useful to adjust the values of the coefficients a_i by requiring an accurate description of nuclear matter properties around k_{F_0}.

In table 1 we give the numerical values of a_i for the interactions G-0 and B1β and from figures 2 and 3 it is seen that they lead to a very good agreement with exact results.

2.3. Functions B, C and D

Figures 4 and 5 show the functions $C(\rho_n, \rho_p)$ and $D(\rho_n, \rho_p)$ with $\rho_n = \rho_p = \frac{1}{2}\rho$, i.e. $C(k_F, \alpha = 0)$ and $D(k_F, \alpha = 0)$, for various potentials. Since these functions and their

Table 1. Values of the coefficients used in the parametrization of the DME functional for the G-0 and B1β interactions (equations (11), (13), (14) and (16)).

	a_0	a_1	a_2	a_3	a_4	a_5	b_1	b_2	b_3	c_1	c_2	d_1	d_2
G-0	−9·1	13·43	12·13	−7·9	19·33	3·3	8·33	−1·6	0·47	−66	111	643	−384
B1β	−7·44	10·27	10·19	−5·3	23·69	14·0	20·47	−3·68	0·17	−136	205	692	−342·6

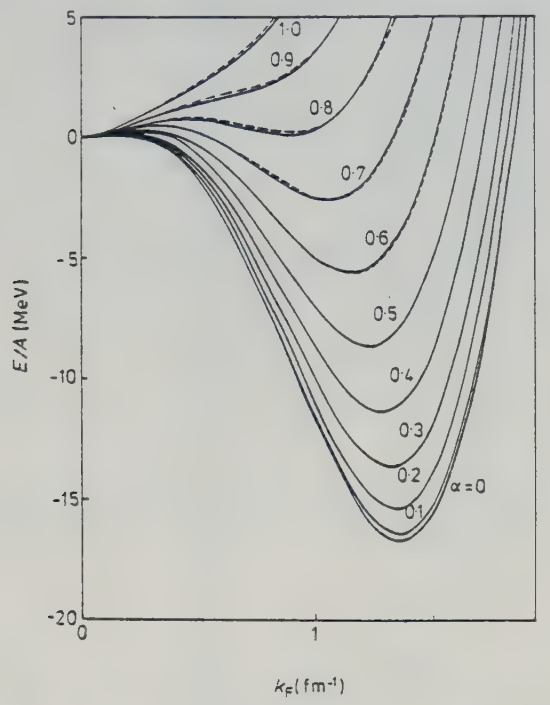


Figure 2. Energy per particle (in MeV) in nuclear matter as a function of k_F and α calculated with G-0. Full curve, parametrization; broken curve, exact.

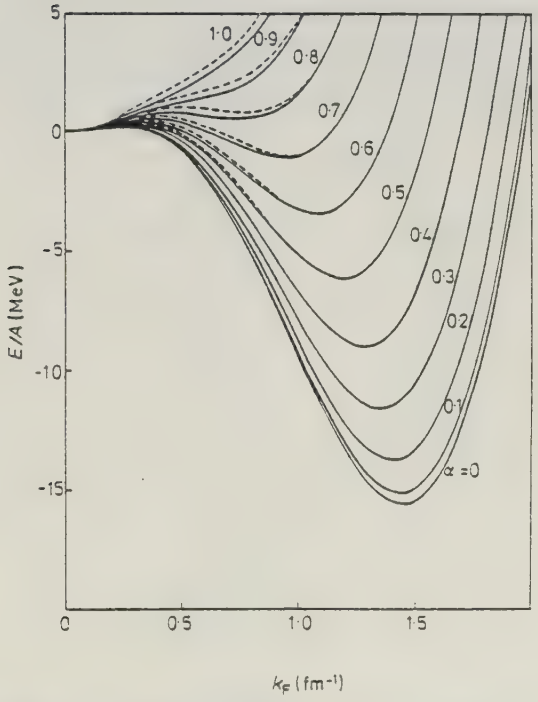


Figure 3. Energy per particle (in MeV) in nuclear matter as a function of k_F and α calculated with B1β. Full curve, parametrization; broken curve, exact.

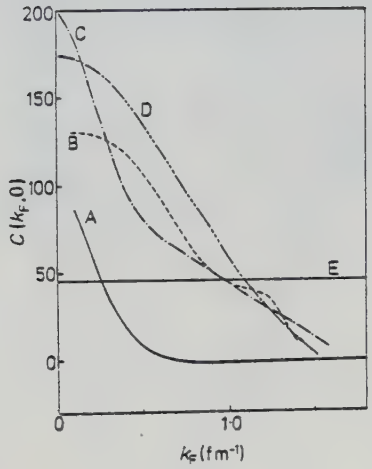


Figure 4. Function $C(k_F,0)$ plotted for various potentials. A, OPEP only; B, Negele interaction; C, Campi–Sprung interaction G-0; D, B1β; E, SKY referring to SKY3 in Beiner *et al* (1975).

derivatives vary very rapidly at low density, we have preferred to tabulate them on a regular mesh in k_F and α rather than in ρ_n and ρ_p as is done by Sprung *et al* (1975). The constant step of 0·1 fm^{-1} in k_F that we have adopted is, for example, equivalent to a step in ρ varying from 6×10^{-5} fm^{-3} at zero density to $3{\cdot}7 \times 10^{-2}$ fm^{-3} around saturation density. The step in α was chosen to be equal to 0·1.

The tabulation of B has been done in the same way and intermediate values needed for the integrals have been obtained with a six point interpolation formula (Abramowitz and Stegun 1964). Our HF calculations with the DME functional H have been performed using the code of Vautherin (1969).

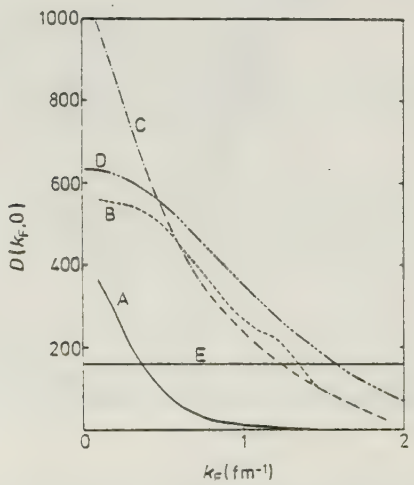


Figure 5. Function $D(k_F,0)$ plotted for the same interactions as figure 4.

Table 2. Binding energy per nucleon (in MeV), proton and neutron radii (in fm) calculated with G-0 force (see footnote on page 292). Column 0, exact HF calculations; column 1, exact DME calculations; column 2, exact DME calculations, except for the effective mass, calculated using U_2 (equation (9)) instead of B (equation (5)); column 3, calculations done with the parametrization of the functional obtained by the DME.

	^{16}O				^{40}Ca				^{48}Ca				^{90}Zr				^{208}Pb			
	0	1	2	3	0	1	2	3	0	1	2	3	0	1	2	3	0	1	2	3
E/A	−6·21	−6·90	−6·94	−6·89	−7·29	−8·22	−8·26	−8·21	−7·42	−8·47	−8·50	−8·45	−7·78	−8·71	−8·73	−8·69	−7·24	−8·05	−8·07	−8·03
r_n	2·81	2·68	2·66	2·69	3·52	3·34	3·33	3·34	3·78	3·57	3·55	3·57	4·44	4·23	4·23	4·23	5·71	5·57	5·58	5·57
r_p	2·83	2·72	2·68	2·72	3·57	3·40	3·39	3·40	3·58	3·38	3·37	3·39	4·35	4·15	4·16	4·15	5·50	5·34	5·37	5·35

2.4. Results

Our results are shown in tables 2 and 3 for G-0 and B1β respectively, and a comparison is made with exact† HF calculations (Vautherin 1969, Campi, private communication).

We obtain slightly overbound nuclei (0·4 to 1·0 MeV per particle) and radii which are too small. In the case of G-0, the radii discrepancy is almost constant (0·2 fm) for all nuclei while in the case of B1β, it increases from 0·1 in ^{16}O to 0·3 fm in ^{90}Zr.

Table 3. Binding energy (in MeV), proton and neutron radii (in fm) calculated with B1β force (see footnote † below). The labels 0, 1 and 3 have the same meaning as in table 2. m^* is the effective mass calculated with equations (8) and (9).

	^{16}O			^{40}Ca			^{48}Ca			^{90}Zr		
	0	1	3	0	1	3	0	1	3	0	1	3
E/A	−6·05	−6·41	−5·95	−6·43	−7·21	−6·89	−6·10	−7·21	−6·88	−6·28	−7·13	−7·06
r_n	2·65	2·56	2·58	3·38	3·20	3·20	3·76	3·46	3·48	4·37	4·06	4·07
r_p	2·67	2·60	2·62	3·43	3·26	3·26	3·51	3·22	3·23	4·25	3·94	3·94

In figures 6, 7 and 8 we show the effect of the DME approximation on the densities. The DME tends to maintain high densities inside the nuclei and to decrease the surface thicknesses. Except for ^{208}Pb calculated with the G-0 interaction, this produces, in all other cases, a smoothing of the oscillations in comparison with those given by exact HF calculations.

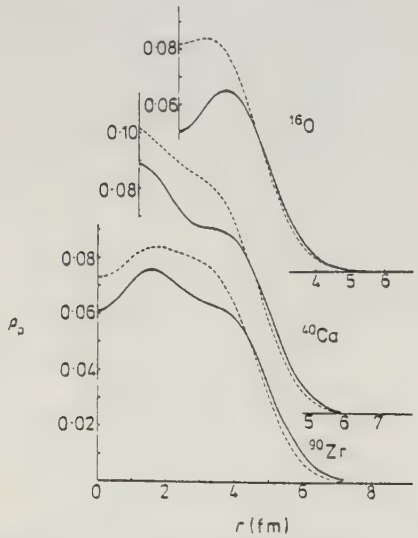


Figure 6. Proton density distributions calculated with G-0. The exact HF calculation is labelled 0 (full curve), the DME calculation 1 (broken curve).

† In the case of G-0, centre-of-mass and starting energy corrections have been neglected. In the case of B1β, we included a centre-of-mass correction (direct term only). In both cases, we have used a short-range spin–orbit force (see, e.g., Negele and Vautherin 1972) with strength $w_0 = -130$ MeV fm^5. We only calculate the direct term of the Coulomb energy.

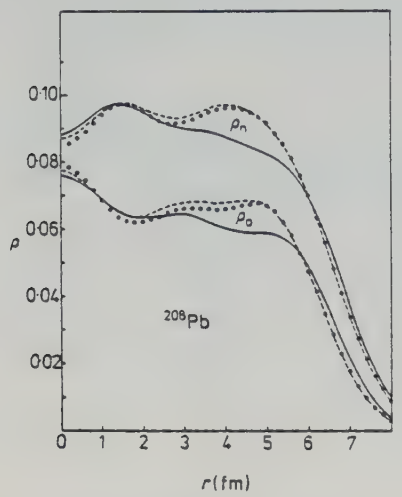


Figure 7. Neutron and proton density distributions calculated with G-0. The exact HF calculation is labelled 0 (full curve), the DME calculation 1 (broken curve) and the DME calculation with an effective mass defined by equations (4) and (5) is labelled 2 (dotted curve).

Figures 9, 10 and 11 display the spectra of individual levels obtained with G-0 and B1β. The discrepancies with exact HF results are similar for all nuclei; the levels are generally overbound by 1 to 2 MeV near the Fermi surface.

In table 2 and figures 9 and 10 the results of calculations using U_2 for the effective mass (equations (8) and (9)) are also presented and are labelled (2). We see that energies per particle, radii, and proton and neutron densities are in good qualitative agreement with those obtained using B (equations (4) and (5)). As could be expected, the main differences appear for single-particle spectra; since the effective mass calculated with U_2 has a smaller value than that obtained with B (for interaction G-0, 0·625 instead of 0·651 at the saturation point of symmetric nuclear matter), it leads

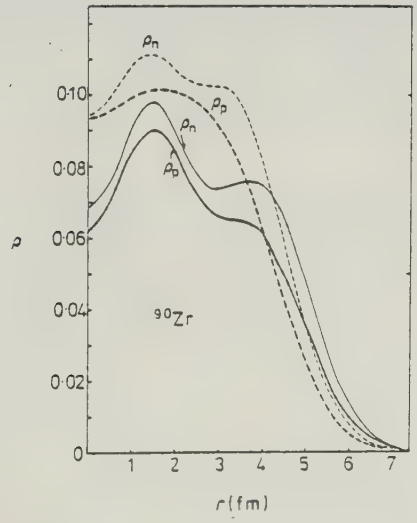


Figure 8. Neutron and proton density distributions calculated with B1β using exact HF calculations (label 0, full curves) and DME method (label 1, broken curves).

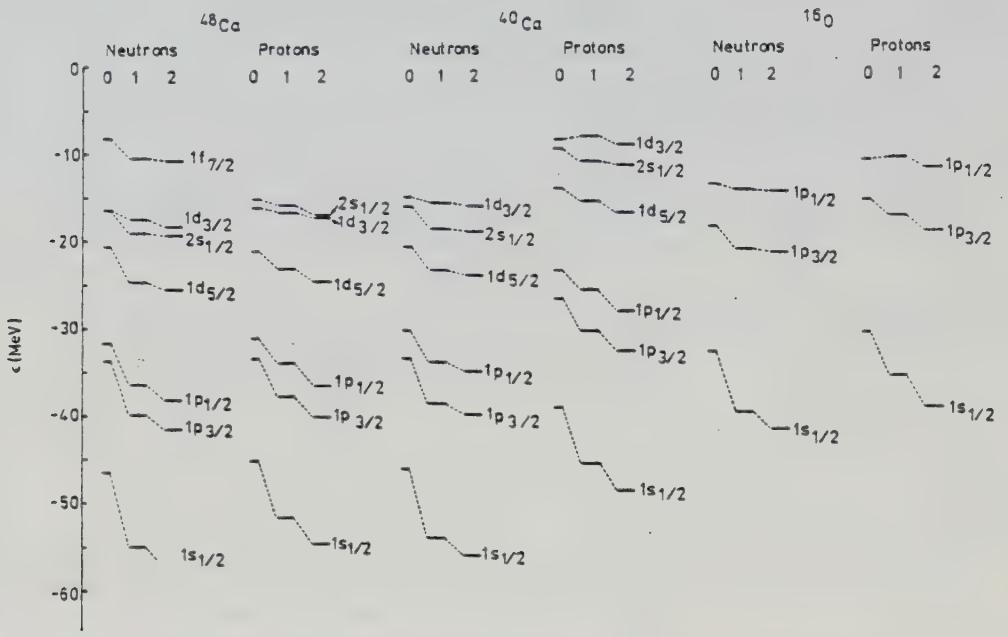


Figure 9. Single-particle spectra for ^{48}Ca, ^{40}Ca and ^{16}O in the case of G-0. The exact HF calculation is labelled 0, the DME calculation 1 and the DME calculation with an effective mass defined by equations (4) and (5) is labelled 2.

to more bound levels and a lower level density. This confirms the conclusion of the discussion made in § 2.1: the best results are obtained with the best fit of the Hartree–Fock field $U(k)$ in the nuclear matter.

3. Parametrization of the functional H

We shall now show that we can obtain the previous results in a shorter way by parametrizing the three matrices $B(\rho_n, \rho_p)$, $C(\rho_n, \rho_p)$, $D(\rho_n, \rho_p)$. Since $B(k_F, \alpha)$ is a smooth function of the variables, we parametrize it with the following simple polynomial formula:

$$\begin{matrix} B_n \\ B_p \end{matrix} = (b_1 k_F^2 + b_2 k_F^3)(1 \mp b_3 \alpha). \tag{13}$$

The coefficients b_i for the interactions G-0 and B1β are given in table 1. With these coefficients, adjusted to give the exact effective mass at the saturation of symmetric nuclear matter, we reproduce accurately the exact functions B_n and B_p within the range $(0, k_{F_0})$.

As mentioned by Negele and Vautherin (1972), these quantities do not depend on the short distance part of the potential because of the factor r^4 which appears in the integrals defining C and D. However, as can be seen in figures 4 and 5, where the functions C and D calculated with different potentials are plotted (for $\alpha = 0$), they differ significantly for potentials with the same long-distance behaviour (potential of Negele and Vautherin (1972, 1975) and G-0), showing that C and D also depend on the medium-range part of the force. In particular they cannot be reproduced with only the OPEP term which gives zero values of C and D when

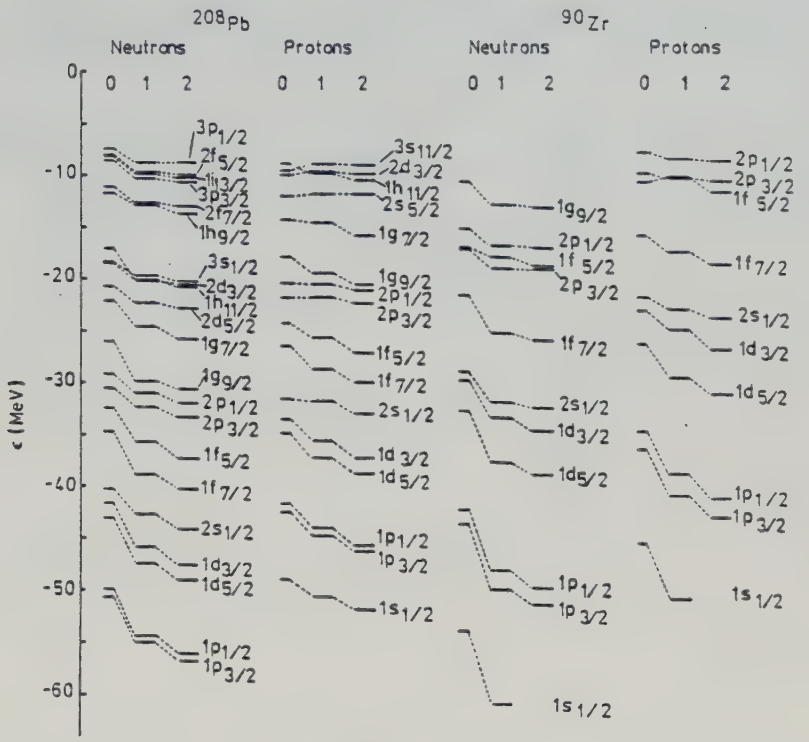


Figure 10. As figure 9 for ^{208}Pb and ^{90}Zr.

k_F is larger than 1 fm^{-1}. This value corresponds to the mean density of the surface of the nucleus where the gradients of the densities are large and consequently the contribution to the total energy of the terms involving C and D is important. So we cannot hope to determine universal functions C and D valid for any reasonable effective interaction.

From figures 4 and 5, one sees that a linear function of k_F provides a reasonable fit of C and D in the region where the gradients of the densities are important ($0{\cdot}7 < k_F < k_{F_0}$). We found that the dependence of D on α^2 is small and could be neglected. We obtained the following expression:

$$D = d_1 + d_2 k_F. \tag{14}$$

From consideration of figure 12, on the contrary one should be tempted to consider that a good parametrization of C should take into account its asymmetry dependence. Indeed, one sees that $C_n(C_p)$ diverges when α comes close to -1 $(+1)$ as $(1/\rho_n)^{1/3}$ $((1/\rho_p)^{1/3})$. In an actual nucleus this kind of divergence can only occur at the outmost surface. Let us suppose that the neutron density extends further than the proton density (the case of $N > Z$ nuclei); then ρ_p decreases as $\exp[-2(\epsilon_p)^{1/2}r]$, where ϵ_p is the proton Fermi energy. Therefore in spite of the divergence of C, the contribution $C_p(\nabla\rho_p)^2$ to the DME Hamiltonian density vanishes as $\exp[-\frac{1}{3}\rho(\epsilon_p)^{1/2}r]$. This shows that the exact reproduction of the behaviour of C_p and C_n for large values of α is not really important in actual nuclei.

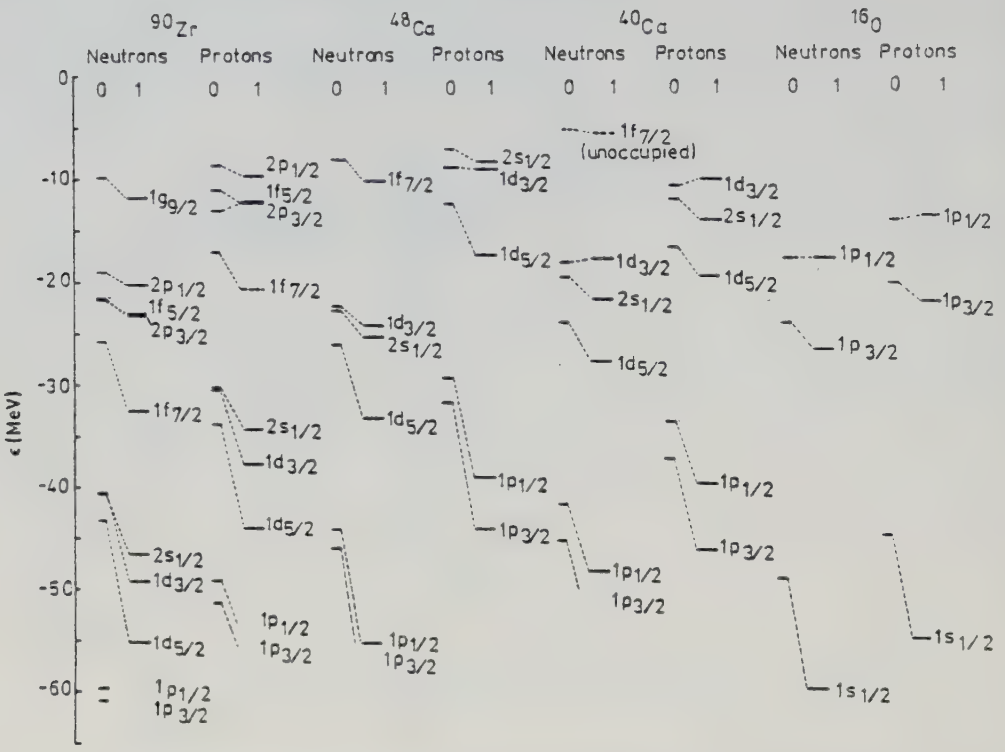


Figure 11. Single-particle spectra in the case of B1β. The exact HF calculation is labelled 0, the DME calculation 1.

Near $\alpha = 0$ one can write

$$C_p = C(1 - \nu\alpha)$$
$$C_n = C(1 + \nu\alpha)$$

where ν is a constant.

The terms $C_n(\nabla\rho_n)^2 + C_p(\nabla\rho)^2$ of the functional H then become

$$C((\nabla\rho_n)^2 + (\nabla\rho_p)^2) + \nu\alpha C((\nabla\rho_n)^2 - (\nabla\rho_p)^2) \tag{15}$$

and the second term is always small in the nuclei that we considered (even in ^{208}Pb as it is the square of the gradients that appears in equation (15)).

For these reasons, we think that the α dependence of C_n and C_p could be neglected without altering the quality of the DME results and we propose the following linear parametrization:

$$C_n = C_p = C_1 k_F + C_2. \tag{16}$$

The coefficients C_1 and C_2 for G-0 and B1β are given in table 1.

The results obtained with the parametrizations given by equations (11), (13), (14) and (16) are shown in column (3) of tables 2 and 3. It is seen that proton and

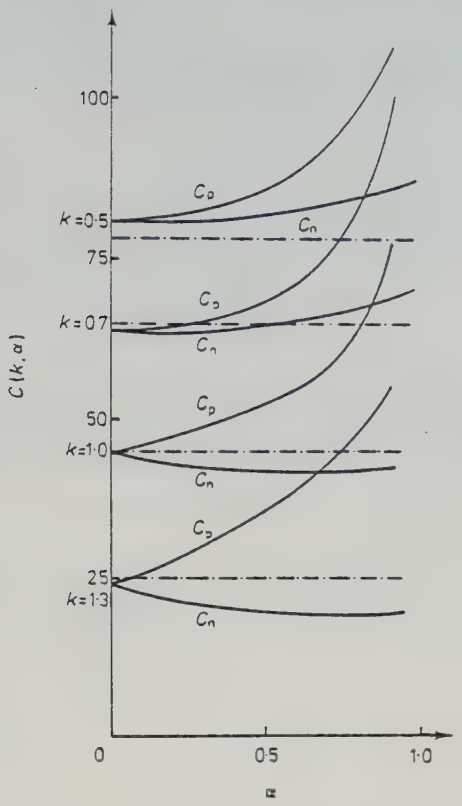


Figure 12. Plot of C_n and C_p (in MeV fm^5) as a function of α for various values of k_F. Full curve, exact; chain curve, parametrization.

neutron radii, energies per particle and single-particle spectra of the exact DME calculation (column (1)) are well reproduced. However the agreement is slightly better for G-0 than for B1β.

4. Comparison with energy density formalism functionals

In the preceding section, we have shown that an accurate reproduction of the DME results with the G-0 effective interaction could be achieved with a polynomial (in k_F and α) parametrization of the functional quantities E/A, B, C and D. This parametrization which introduces the 14 coefficients (including the spin–orbit strength) displayed in table 1 gives the Hamiltonian densities a form very similar to that derived within the energy density formalism (Beiner and Lombard 1974). Using an Hamiltonian density with a structure partly suggested by theoretical considerations, Beiner and Lombard have adjusted the 11 parameters of their functional so as to reproduce masses and charge densities of magic nuclei. In view of the formal similarity of the two Hamiltonian densities, it is interesting to compare the numerical values of our coefficients with those of their corresponding parameters.

We have chosen to compare the parametrization obtained for G-0 interaction with the functional constructed from the set of parameters labelled F_2 in Beiner and Lombard (1974), which leads to properties of nuclear matter quite similar to

Table 4. Comparison of nuclear matter properties calculated with G-0 and with one of the functionals used by Beiner and Lombard (1974).

	F2	G-0
E_0	−16	−16·7
k_F	1·32	1·36
K	280	182
E_s	34	35·5
m^*/m	0·67	0·625

those of G-0, as can be seen in table 4. We show in table 8 the coefficients a_i corresponding to the set of parameters F_2 of Beiner and Lombard (BL).

This set of parameters F_2 leads to the following constant values of C and D:

$$C = 51{\cdot}7 \text{ MeV fm}^5$$
$$D = 203{\cdot}4 \text{ MeV fm}^5.$$

These values cannot be compared directly with those obtained for G-0, which are functions of the density. However, in nuclei where we can assume $\rho_n = \rho_p = \frac{1}{2}\rho$ the gradient terms of the DME functional can be written

$$C_n(\nabla\rho_n)^2 + C_p(\nabla\rho_p)^2 + D\nabla\rho_n.\nabla\rho_p = \tfrac{1}{4}(2C + D)(\nabla\rho)^2 \tag{17}$$

and at the mean density of the surface ($k_F \simeq 1{\cdot}1$ fm^{-1}) where the contribution of the terms given in equation (17) is the most important, we have

$$2C + D = 280 \text{ MeV fm}^5$$

compared with the value 306·8 in the case of Beiner and Lombard.

Thus, we see that the two functionals are very similar; the main differences appear essentially in the Fermi momentum, which is smaller in the case of BL, and in the compression modulus which is greater.

This difference in Fermi momenta explains why we obtain smaller radii (1% and 1·6%) in heavy nuclei (for ^{90}Zr and ^{208}Pb respectively) with our functional. The single-particle spectra and level densities near the Fermi surface are in good qualitative agreement.

5. Equivalent Skyrme-type interaction

We shall now show that it is possible (in the case of interaction G-0) to simplify our parametrization while maintaining the quality of the results and find a Hamiltonian density identical to that obtained with a Skyrme-like interaction. A similar attempt has been made by Negele and Vautherin (1975).

The nuclear matter energy of a Skyrme force takes the form

$$H/\rho = E/A = \tfrac{3}{5}T_F + \tfrac{3}{8}t_0\rho + \tfrac{1}{16}t_3\rho^2 + \tfrac{3}{80}(3t_1 + 5t_2)\rho k_F^2 \tag{18}$$

where T_F is the kinetic energy of the Fermi level, and the compression modulus at saturation K is related to E/A and T_F by the relation

$$K = -15(E/A) + \tfrac{9}{5}T_F + \tfrac{3}{16}t_3\rho^2. \tag{19}$$

As the ρ-dependent term of the force is repulsive, t_3 is positive; then K is necessarily larger than 300 MeV.

Indeed, in the case of G-0, $(E/A) = -16{\cdot}7$ MeV and $k_f = 1{\cdot}355$ fm^{-1}. Then

$$-15(E/A) + \tfrac{9}{5}T_F = 319 \text{ MeV}$$

so we have $K > 319$ MeV, compared with the value 182 MeV of G-0.

Then it is impossible to find a Skyrme interaction having similar nuclear matter properties as G-0. For this reason we modify the power of the density dependence of the t_3 term and introduce a new parameter β, as in Moszkowski (1970), Köhler (1971) and Ehlers and Moszkowski (1972).

Equation (18) then becomes

$$H/\rho = E/A = \tfrac{3}{5}T_f + \tfrac{3}{8}t_0\rho + \tfrac{1}{16}t_3\rho^{1+\beta} + \tfrac{3}{80}(3t_1 + 5t_2)\rho k_F^2 \tag{20}$$

and the expression for the compression modulus becomes

$$K = -15(E/A) + \tfrac{9}{5}T_f + \tfrac{3}{16}t_3\rho^{1+\beta}\beta(3\beta - 2). \tag{21}$$

The symmetry energy is given by

$$E_s = \tfrac{1}{3}T_f - \tfrac{1}{4}t_0(x_0 + \tfrac{1}{2})\rho - \tfrac{3}{16}t_3\rho^{1+\beta} + \tfrac{1}{8}t_2\rho k_F^2 \tag{22}$$

and the expression for the effective mass is

$$\frac{\hbar^2}{2m^*} = \frac{\hbar^2}{2m} + B$$

with

$$B = \tfrac{1}{16}(3t_1 + 5t_2)\rho. \tag{23}$$

The functions C and D are constant and are given by

$$C = \tfrac{3}{32}(t_1 - t_2) \tag{24}$$

$$D = \tfrac{1}{8}(3t_1 - t_2) \tag{25}$$

$$2C + D = \tfrac{1}{16}(9t_1 - 5t_2). \tag{26}$$

From equation (21), we see that with $\beta < \frac{2}{3}$ the compression modulus certainly decreases. So we have considered the two cases where $\beta = \frac{1}{6}$ and $\beta = 1$ (for comparison since it corresponds to the original Skyrme interaction).

It is impossible to determine t_1 and t_2 from equations (23), (24) and (25) simultaneously. But since the combination $2C + D$ is particularly important when $\rho_n \sim \rho_p$, we use equation (26) to determine $9t_1 - 5t_2$. The HF results are very sensitive to the choice of the value $2C + D$. The best ones are obtained with the coefficients C and D determined with the optimization method used in appendix 1; we look for the best constant λ which minimizes the quantity

$$Q(\lambda) = \int_0^{k_{f_0}} (2C(k_f) + D(k_f) - \lambda)^2 P(k_f)\,\mathrm{d}k_f \tag{27}$$

where

$$P(k_F) = 3k_F^2/k_{F_0}^3.$$

$C(k_f)$ and $D(k_f)$ are given by equations (14) and (16) and k_{F_0} is the saturation momentum of symmetric nuclear matter. We found $\lambda = 340{\cdot}4$ MeV fm^5.

Next, to determine $3t_1 + 5t_2$ from equation (23), we minimize the quantity

$$R(\mu) = \int_0^{k_{F_0}} (B(k_F) - \mu k_F^3 P(k_F)\, dk_F \tag{28}$$

where $B(k_F)$ is given by equation (13) with $\alpha = 0$.

We found $\mu = 5{\cdot}31$ MeV fm^2, which, together with the value of λ, gives t_1 and t_2. Then the dependence of B on α is given by the expression

$$B_{\substack{n\\p}} = \tfrac{1}{4}(t_1 + t_2)\,\rho + \tfrac{1}{8}(t_2 - t_1)\,\rho_{\substack{n\\p}}$$

which holds for any Skyrme interaction, and C and D are calculated by equations (24) and (25).

Table 5. Parameters of Skyrme-forces. SG-0 refer to the Skyrme-type forces constructed starting from G-0. We give for comparison the parameters of the Skyrme force SKY3 of Beiner *et al* (1975). (t_0 in MeV fm^3, t_1 in MeV fm^5, t_2 in MeV fm^5, t_3 in MeV fm^6.)

	β	t_0	t_1	t_2	t_3	x_0	K
SG-0	$\frac{1}{6}$	−2248	558·8	−83·7	11224†	0·715	253
	1	−1089	558·8	−83·7	8272	0·412	363
SKY3	1	−1129	395	−95	14000	0·450	356

† In MeV fm$^{3/2}$.

Inserting t_1 and t_2 in equations (20) and (22), we determine t_0, t_3 and x_0 by the saturation properties of G-0 (k_{F_0}, $E_0 = (E/A)(k_{F_0})$, E_s). The two sets of parameters obtained are presented in table 5, together with the values of K to which they lead.

One should point out that the choice $\beta = \frac{1}{6}$ gives a value of t_0 which is twice as large as the usual ones (Beiner *et al* 1975); the mechanism of saturation, not studied here, is certainly very different with this Skyrme-like force from what it is usually.

The results obtained with the two Skyrme-like interactions ($\beta = \frac{1}{6}$ and $\beta = 1$) are shown in table 6, and are compared with those of exact DME calculations.

We see that the linear density dependence ($\beta = 1$) of the force gives rise to important discrepancies for energies per particle (0·3 to 0·7 MeV) and for radii (0·1 to 0·2 fm too small). This can also be seen in figure 13 where we compare the proton density distributions in ^{16}O and ^{208}Pb.

On the contrary, the $\rho^{1/6}$ dependence of the force gives a good overall agreement with the results of the DME calculations. The same conclusion holds also for the one-particle spectra (which are not reproduced here).

6. Conclusion

This study shows that the accuracy of the DME approximation is quite sensitive to the initial two-body force. Namely, the results of the DME calculations we have performed with G-0 and B1β forces do not confirm those of Negele and Vautherin (1972). With the Negele and Vautherin force the difference between exact HF calculations and DME is found to be less than 1·5% for radii and densities and less than

Table 6. Comparison of the results of DME calculations (column 1) with the results obtained from the two Skyrme-type forces constructed with a $\rho^{1/6}$ dependence (column 4) and with a ρ dependence (column 5).

	^{16}O			^{40}Ca			^{48}Ca			^{90}Zr			^{208}Pb		
	1	4	5	1	4	5	1	4	5	1	4	5	1	4	5
E/A	−6·90	−7·04	−6·20	−8·22	−8·22	−7·35	−8·47	−8·39	−7·80	−8·71	−8·63	−8·11	−8·05	−7·86	−7·41
r_n	2·68	2·67	2·62	3·34	3·34	3·29	3·57	3·58	3·52	4·23	4·23	4·17	5·57	5·54	5·43
r_p	2·72	2·70	2·64	3·40	3·39	3·33	3·38	3·41	3·30	4·15	4·16	4·05	5·34	5·36	5·14

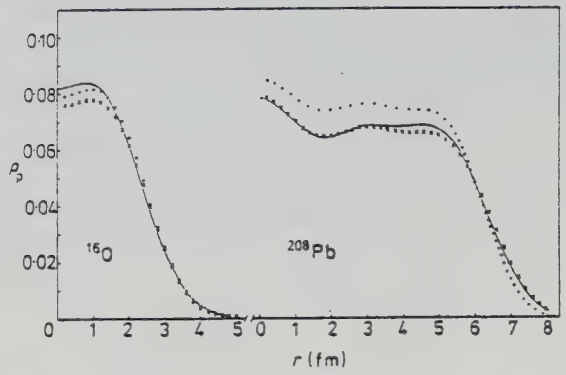


Figure 13. Proton density distributions in ^{16}O and ^{208}Pb (in fm^{-3}). We compare the results of the DME (label 1, full curve) with those obtained with the two Skyrme-type forces—with a $\rho^{1/6}$ dependence (label 4, crossed curve) and with a ρ dependence (label 5, dotted curve).

10% for binding energies. However our results confirm those of Sprung *et al* (1975), where the radii are found to be too small (by 2·5%–8%) and the average binding energies too large (by 11%–18%); they equally confirm the fact that the differences with the exact HF calculations do not depend on the masses of the nuclei.

Moreover our results are better, i.e. closer, to those of exact HF calculations, with the G-0 force than with the B1β force. This is explained by Sprung *et al* (1975) by the very significant differences in the ratio of direct to exchange terms between these two forces, the DME being much better for exchange terms. We can also think that this is correlated to the fact that the B1β force gives densities which are much more oscillating in the central region of the nucleus than the G-0 force where the core is more like nuclear matter. The single-particle energies calculated with the DME reproduce those given by exact HF calculations qualitatively. The shift of the levels suggests that the effective masses calculated by the DME are too small.

The simple parametrization of the Hamiltonian we have derived allows us to make the connection between the DME and the EDF approaches (Beiner and Lombard 1974) where the parameters of the functional H are fitted. Indeed we have seen that our parametrization leads to a good fit to the exact DME results.

In the last part of this work we have attempted to parametrize the Hamiltonian density H by energy functionals derived from Skyrme-like forces. We have shown that this can be achieved in the case of the G-0 force provided a $\rho^{1/6}$ density dependence is used. Indeed, in this case excellent fits to radii, binding energies and single-particle energies have been obtained. For the B1β force we have not been able to reproduce the DME results. This may be due to the lack of density dependence of the B1β force.

Acknowledgments

We would like to express our appreciation to D Vautherin for suggesting this study to us and for his constant support during the course of this work. We would also like to express our thanks to H Flocard for critical reading of the manuscript and illuminating conversations. We also are indebted to X Campi and C Schmit for

helpful discussions and interesting suggestions. Finally, we are grateful to Professor D W L Sprung for stimulating comments.

Appendix 1

The usual definition (Brown 1967) of the effective mass comes from the expansion of the HF field in nuclear matter:

$$U(k) = \sum_{n \leqslant k_F} \langle kn|V|kn\rangle - \langle kn|V|nk\rangle = U_0 + k^2 U_2 + \ldots.$$

The expansion is truncated to second order and the one-particle energy $\epsilon(k)$ is defined by

$$\epsilon(k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + U(k) \simeq \frac{\hbar^2}{2m} k^2 + U_0 + k^2 U_2 = \frac{\hbar^2}{2m^*} k^2 + U_0$$

where

$$\frac{\hbar^2}{2m^*} = \frac{\hbar^2}{2m} + U_2.$$

For a central force, one obtains

$$U(k) = \frac{2}{\pi} k_F^2 \left(\frac{k_F}{3} \int_0^\infty \sum_D V(r)\, r^2 \, dr - \int_0^\infty r \sum_E V(r)\, j_0(kr)\, j_1(k_F r)\, dr \right) \quad \text{(A.1)}$$

which gives

$$U_0 = \frac{2k_F^3}{3\pi} \int_0^\infty \sum_D V(r) r^2 \, dr - \frac{2k_F^2}{\pi} \int_0^\infty \sum_E V(r) r j_1(k_F r) dr \quad \text{(A.2)}$$

$$U_2 = \frac{k_F^2}{3\pi} \int_0^\infty \sum_E V(r) r^3 j_1(k_F r)\, dr \quad \text{(A.3)}$$

with

$$\sum_D V(r) = \tfrac{1}{4}(V^{11} + 3V^{13} + 3V^{31} + 9V^{33})$$

$$\sum_E V(r) = \tfrac{1}{4}(V^{11} - 3V^{13} - 3V^{31} + 9V^{33}).$$

This formula does not coincide with the expression given by the DME. Indeed, equation (4.43) of Negele and Vautherin (1972), which determines the individual wavefunctions, has the form

$$[-\nabla(\hbar^2/2m) + B(\rho_n, \rho_p)\nabla + V - E]\phi_n = 0.$$

In nuclear matter, where ϕ_n are plane waves,

$$E(k) = [(\hbar^2/2m) + B]k^2 + V.$$

The one-body potential is then equal to $V + Bk^2$, which defines the effective mass

$$\frac{\hbar^2}{2m^*} = \frac{\hbar^2}{2m} + B$$

with

$$B = \frac{35}{\pi k_f} \int_0^\infty \sum_E V(r)\, j_1(k_f r)\, j_3(k_f r)\, \mathrm{d}r.$$

We will now show that this definition provides a least-squares fit of $U(k)$ by the parabola $V + Bk^2$ in the range $(0, k_F)$ with a weight

$$P(k) = \frac{4\pi k^2 \mathrm{d}k}{\frac{4}{3}\pi k_f^3 \mathrm{d}k} = \frac{3k^2}{k_f^3}.$$

Indeed, let us consider the quantity

$$Q(\lambda, \mu) = \int_0^{k_F} [U(k) - (\lambda + \mu k^2)]^2\, P(k)\, \mathrm{d}k.$$

The following equations

$$\partial Q/\partial \lambda = 0$$

$$\partial Q/\partial \mu = 0$$

give

$$\lambda = \langle U(k) \rangle - \mu \langle k^2 \rangle \tag{A.4}$$

$$\mu = \frac{\langle k^2 \rangle \langle U(k) \rangle - \langle k^2 U(k) \rangle}{\langle k^2 \rangle^2 - \langle k^4 \rangle} \tag{A.5}$$

where

$$\langle f(k) \rangle = \int_0^{k_F} f(k)\, P(k)\, \mathrm{d}k.$$

Since

$$U(k) = U_D + U_E(k)$$

where U_D is constant, we obtain

$$\mu = \frac{\langle k^2 \rangle \langle U_E \rangle - \langle k^2\, U_E \rangle}{\langle k^2 \rangle^2 - \langle k^4 \rangle}.$$

Equation (A.1) then gives

$$\langle U_E(k) \rangle = -\frac{6k_f}{\pi} \int_0^\infty \sum_E V(r)\, j_1^2(k_f r)\, \mathrm{d}r$$

and

$$\langle U_E(k) \rangle = -\frac{6k_F}{\pi} \int_0^\infty \sum_E V(r) j_1^2(k_F r)\, \mathrm{d}r$$

Together with the relations

$$\langle k^2 \rangle = \tfrac{3}{5} k_f^2$$

and

$$\langle k^4 \rangle = \tfrac{3}{7} k_f^4$$

one obtains

$$\mu = B = \frac{35}{\pi k_F} \int_0^\infty \sum_E V(r)\, j_1(k_F r)\, j_3(k_F r)\, \mathrm{d}r. \tag{A.6}$$

Inserting this expression in equation (A.4), one has

$$\lambda = V = \frac{2k_F^3}{3\pi} \int_0^\infty \sum_D V(r)\, r^2\, \mathrm{d}r - \frac{3k_F}{\pi} \int_0^\infty \mathrm{d}r \sum_E V(r)\, j_1(k_F r)\, (2j_1(k_F r) + 7j_3(k_F r)). \tag{A.7}$$

Expressions (A.6) and (A.7) coincide with expressions (A.3) and (A.2) as $k_F \to 0$.

Indeed

$$35\, j_1(k_F r)\, j_3(k_F r) \to \tfrac{1}{3} j_1(k_F r)\, (k_F r)^3$$

and

$$j_1(k_F r)\, (2j_1(k_F r) + 7j_3(k_F r)) = \frac{2k_F r}{3} j_1(k_F r) \left(1 - \frac{(k_F r)^4}{504} + \ldots\right).$$

We show in figure 1 the HF field $U(k)$ and the two parabolae. It is clear that the DME gives a much better fit in the region where the values of the density are important, and that it leads to a larger value for the effective mass.

Appendix 2

The energy of an infinite system of protons and neutrons, with Fermi momenta k_p and k_n respectively, can be written (to the first order of perturbation theory) as

$$E = \tfrac{1}{2}\left(\sum_{\substack{m \leqslant k_p \\ n \leqslant k_n}} \langle mn|V|mn\rangle + \sum_{m,n \leqslant k_p} \langle mn|V|mn\rangle + \sum_{m,n \leqslant k_n} \langle mn|V||mn\rangle + \text{exc terms} \right). \tag{A.8}$$

The usual quantities of such a system are E_0, the energy per particle at saturation density, k_{F_0}, the saturation momentum of symmetric nuclear matter, $E_s = \frac{1}{2}[(\partial^2 E/A)/\partial\alpha^2]$, the symmetry energy at the saturation point and $K = k_{F_0}^2[(\partial^2 E/A)/\partial k_F^2]$, the compression modulus at the saturation point.

The curves $E/A = f(k_F, \alpha)$ are plotted in figures 2 and 3 for potentials G-0 and B1β respectively. As already noted by other authors (Cameron and Weiss 1969), one obtains a decrease of saturation density as α increases. It can be shown, using an expansion about k_{F_0}, that the shift Δk_F of the saturation momentum has the form

$$\frac{\Delta k_F}{k_{F_0}} = -b_1' \alpha^2 - b_2' \alpha^4 \tag{A.9}$$

with

$$b_1' = \frac{k_{F_0}}{K} \left(\frac{\partial E_s}{\partial k_F}\right)_{k_F = k_{F_0}} \qquad b_2' = \frac{1}{2}\left(\frac{k_F}{K}\right)^3 \left(\frac{\partial E_s}{\partial k_F}\right)^2 \left(\frac{\partial K}{\partial k_F} - \frac{2K}{k_F}\right)_{k_F = k_{F_0}}.$$

We will also need the calculations of $\partial E_s/\partial k_F$ and $\partial K/\partial k_F$.

The results are shown in table 7, where we add, for comparison, the results given with some other effective forces. As can be seen from figure 14, E/A has a linear dependence in α^2, when k_F is kept constant, up to values of α near 1. We verified that the

Table 7. Nuclear matter properties of various forces. All the quantities are in MeV except $\partial E_s/\partial k$ which is in MeV fm.

Potential	k_{F_0}	E_0	E_s	K	$\partial K/\partial k$	$\partial E_s/\partial k$
LEV (Levinger and Simmons 1961)	1·39	−17·35	32	270	1360	68·5
PEAR (Saunier and Pearson 1970)	1·35	−15·3	31	240	1205	24
BAR (Nestor *et al* 1968)	1·38	−14·9	42·4	293	1518	106
B1β	1·45	−15·65	49·8	184	616	98·1
G-0	1·36	−16·7	35·5†	182	619	58·3
SG-0	1·36	−16·7	35·5	253	1220	29·5
SKY3	1·29	−15·9	28·2	356	2422	7·9

† With the re-arrangement symmetry energy.

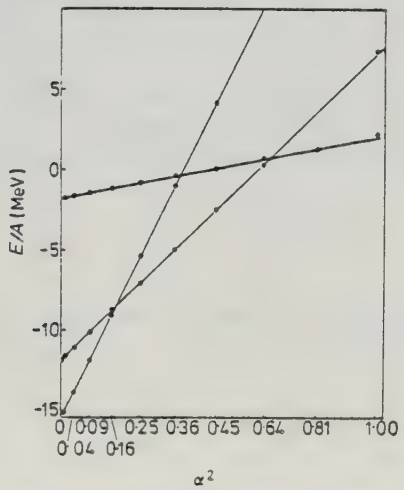


Figure 14. Energy per particle (in MeV) in nuclear matter calculated with G-0 as a function of α^2 for various values of k_F.

coefficient of α^4 in the expansion of E/A is small (less than 0·5 for G-0 and B1β). Inserting a k_F^2 dependence at low density (to take into account the kinetic energy), one has a parametrization of E/A of the form

$$E/A = k_F^2(a_0 + a_1\Delta k + a_2\Delta k^2 + a_3\Delta k^3) + \alpha^2 k_F^2(a_4 + a_5\Delta k)$$

where $\Delta k = k_F - k_{F_0}$.

Table 8. Coefficients of the parametrization of E/A in nuclear matter as a function of k_F and α. b'_1 and b'_2 give the shift of the saturation momentum when α increases (equation (A.9)). (BL, the Beiner–Lombard (1974) functional.)

Potential	a_0	a_1	a_2	a_3	a_4	a_5	b'_1	b'_2
B1β	−7·44	10·27	10·19	−5·3	23·69	14·0	0·77	0·85
G-0	−9·1	13·43	12·13	−7·9	19·33	3·30	0·36	0·17
SG-0	−9·1	13·43	22·70	2·0	19·33	1·05	0·16	0·06
SKY3	−9·5	14·79	47·1	30·6	16·92	−8·2	0·03	0·003
BL	−9·2	13·89	30·3	9·7	19·51	4·47	—	—

It is easy to see that the a_i'are related to the quantities calculated above by the following relations:

$$a_0 = \frac{E_0}{k_{F_0}^2}$$

$$a_1 = -\frac{2}{k_{F_0}^3} E_0$$

$$a_2 = \frac{K}{2k_{F_0}^4} + 3\frac{E_0}{k_{F_0}^4}$$

$$a_3 = \frac{1}{k_{F_0}^3}\left(\frac{k_{F_0}}{6}\frac{\partial K}{\partial k_{F_0}} - 4E_0 - \tfrac{4}{3}K\right)$$

$$a_4 = \frac{E_s}{k_{F_0}^2}$$

$$a_5\dagger = \frac{1}{k_{F_0}^2}\left(\frac{\partial E_s}{\partial k_{F_0}} - 2\frac{E_s}{k_{F_0}}\right).$$

The results are presented in table 8.

The equations (A.9) which define the coefficients b_1 and b_2 confirm the inability of the usual Skyrme interactions to describe correctly nuclei with large neutron excess. Indeed, in the case of Skyrme forces, the decrease of Fermi momentum when α increases is practically zero because of the high values of K and the smallness of $\partial E_s/\partial k$.

References

Abramowitz A and Stegun I A 1964 *Handbook of Mathematical Functions* (Washington: National Bureau of Standards) p 883

Beiner M, Flocard H, Nguyen Van Giai and Quentin P 1975 *Nucl. Phys.* A **238** 29

Beiner M and Lombard R J 1974 *Ann. Phys. NY* **86** no 2 262

Brink D M and Boecker E 1967 *Nucl. Phys.* A **91** 1

Brown G E 1967 *Theory of Nuclear Models and Forces* (Amsterdam: North-Holland)

Cameron A G W and Weiss R A 1969 *Can. J. Phys.* **47** 2171

Campi X and Sprung D W 1972 *Nucl. Phys.* A **194** 401

Ehlers J V and Moszkowski S A 1972 *Phys. Rev.* C **6** 217

Flocard H, Quentin P, Vautherin D, Veneroni M and Kerman A K 1974 *Nucl. Phys.* A **231** 176

Köhler H S 1971a *Nucl. Phys.* A **162** 385

——1971b *Nucl. Phys.* A **170** 88

Levinger J S and Simmons L M 1961 *Phys. Rev.* **124** 916

Moszkowski S A 1970 *Phys. Rev.* C **2** 402

Negele J W and Vautherin D 1972 *Phys. Rev.* C **5** 1472

——1975 *Phys. Rev.* C **11** 1031

Nestor C W, Davies K T R, Krieger S J and Baranger M 1968 *Nucl. Phys.* A **113** 14

Saunier G and Pearson J M 1970 *Phys. Rev.* C **1** 1353

Sprung D W L, Vallieres M, Campi X and Che-Ming Ko 1975 *Nucl. Phys.* A **253** 1

Vautherin D 1969 *Thèse* Orsay

Vautherin D and Brink D M 1972 *Phys. Rev.* C **5** 626

Veneroni M and Vautherin D 1969 *Phys. Lett.* **29B** 203

† In this work, the coefficient a_5 has been determined to give a good agreement with the function $E_s(k_F)$ in the range $0 \leqslant k_F \leqslant k_{F_0}$.

EXTENSIONS OF THE THOMAS-FERMI APPROXIMATION FOR FINITE NUCLEI

O. BOHIGAS, X. CAMPI, H. KRIVINE and J. TREINER
*Institut de Physique Nucléaire, Division de Physique Théorique *, 91406 Orsay Cedex, France*

Received 16 August 1976

Inhomogeneity terms in the expansion of the kinetic energy density are included and the Euler–Lagrange equations solved. Shell effects may be incorporated in a simple way. The study of spherical shapes of large systems is given as an illustration of the method proposed.

In recent years, the description of bulk properties of nuclei has met considerable success by the use of the static Hartree–Fock (HF) method. Recently, also dynamical calculations have been attempted. Although the use of schematic effective forces [1–4] drastically simplifies the calculations, they still remain very involved, especially if one is interested in the description of heavy nuclei, or, even more, in the description of fission barriers, heavy ion collisions etc.. It is then natural to ask, especially if one keeps in mind the schematic nature of the forces used, wether a procedure like HF or its time dependent version is not actually an overdetailed one. Surprisingly enough, the complexity of the calculations using simplified effective forces is due, to a large extent, not to the interaction term, but to the kinetic energy one. It seems thus worthwhile to look for approximate treatments of the kinetic energy that may introduce essential simplifications in the whole approach.

The Thomas–Fermi (TF) approximation is a well known alternative procedure to the HF method. One approximates † the kinetic energy density $\tau(r) = (\hbar^2/2m)\Sigma_i |\nabla\phi_i|^2$, where i labels occupied states ϕ_i, by $\tau_{TF} \propto \rho^{5/3}$, where ρ is the one-body density. If the TF approximation is used in conjunction with the above mentioned schematic forces, one is lead to an energy density formalism [5], in which the energy E is a functional of the density ρ. Instead of dealing, as in the HF method, with as many functions as single-particle occupied states, one deals only with one function ρ. Among the drawbacks of the TF approximation let us mention its well known failure to correctly describe the nuclear surface as well as its unability to include shell effects.

The purpose of the present work is to go as far as we can from the results obtained in some improved TF (ITF) approximation towards static HF ones, with special emphasis on the simplicity of the procedure. Only interactions leading to a local energy density formalism shall be treated. We want to stress the following two points:

(i) when an ITF approximation is used (essentially by including the Weizsäcker [6] term), one obtains solutions ρ_{ITF} that have the exponential fall off at large distances and the Euler equation can be integrated over the whole range of values of r (from zero to infinity).

(ii) if one wishes to further improve the treatment, in particular by including shell effects, one takes the functions ρ_{ITF} and τ_{ITF} thus obtained to calculate a one-body potential and solve a Schrödinger equation once for each s.p. state.

Our starting point is the semi-classical expansion (in powers of $\hbar^2$) of the kinetic energy density $\tau(r)$ in terms of ρ as explained in ref. [7] (the same expansion has been recently obtained [8, 9] using the method proposed by Bhaduri and Ross [10]). If, for a system of particles in a central local field, one keeps the first two terms in this expansion, the resulting approximate kinetic energy density, that we shall denote by τ_{ITF}, reads

$$\tau_{ITF} = (\hbar^2/2m)(\alpha\rho^{5/3} + \beta((\nabla\rho)^2/\rho) + \gamma\Delta\rho)\,, \qquad (1)$$

where $\alpha = (\frac{3}{5})(3\pi^2)^{2/3}$, $\beta = \frac{1}{36}$ and $\gamma = \frac{1}{3}$. The first term in (1) corresponds to the standard TF approximation and the second one is the modified Weizsäcker term [5].

* Laboratoire associé au C.N.R.S.

† Although in the numerical applications we treat protons (with the Coulomb force) and neutrons, the discussion and notation will be simpler by treating identical particles.

When using the approximation $\tau \simeq \tau_{\mathrm{TTF}}$ and restricting to spherically symmetric systems, the Hamiltonian density $H(r)$ we deal with can be written as

$$H(r) \approx P(\rho) + |\nabla\rho|^2 \left(d + \frac{\hbar^2}{2m}\frac{\beta}{\rho}\right) + \frac{\hbar^2}{2m}\gamma\Delta\rho\,, \qquad (2)$$

where $P(\rho)$ is a sum of powers ν of ρ, with $\nu > 1$; to $P(\rho)$ contribute genuine interaction terms, the TF kinetic energy term $\alpha\rho^{5/3}$ as well as terms of the form $\rho\tau$ induced by a momentum-dependent interaction, leading to $\alpha\rho^{8/3}$ by use of (1); similarly, to the constant d may contribute genuine interaction terms as well as terms induced by β and γ in (1) through such momentum-dependent interactions. We look for the function ρ that minimizes the energy E with respect to variations of ρ and with the constraint of keeping the number A of particles constant. The Euler–Lagrange equation has the form

$$\frac{\partial P}{\partial\rho} + \frac{\hbar^2}{2m}\beta\frac{|\nabla\rho|^2}{\rho^2} - 2\Delta\rho\left(d + \frac{\hbar^2}{2m}\frac{\beta}{\rho}\right) = \lambda\,. \qquad (3)$$

The Lagrange multiplier λ is equal to $\partial E/\partial A$, i.e. corresponds to the one particle separation energy. We look for solutions of (3) that vanish at large distances. The asymptotic form (see also ref. [11]) of (3) is

$$\frac{|\nabla\rho|^2}{\rho} - 2\Delta\rho = \frac{2m}{\hbar^2}\frac{\lambda}{\beta}\rho\,, \qquad (4)$$

which leads to

$$\rho \underset{r\to\infty}{\sim} \frac{1}{r^2}\exp\left(-\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}\frac{\lambda}{\beta}}\,r\right) = \frac{1}{r^2}\exp\left(-6\sqrt{-\frac{2m}{\hbar^2}\lambda}\,r\right), \qquad (5)$$

i.e., there are solutions with the exponential fall-off appropriate for a finite quantum-mechanical system. It is worth noticing that this asymptotic behaviour is due to the inhomogeneity Weizsäcker term: without it ($\beta = 0$), the asymptotic form of (3) would be $\Delta\rho$ = constant, which has no physical acceptable solution over the whole space. The presence in (3) of a $\Delta\rho$ term, when limiting to regular solutions of ρ at any point, insures that $\rho' = 0$ at the origin.

It is in order here to compare the asymptotic behaviour given by eq. (5) to the one corresponding to a shell model wave function whose least bound orbital has energy ϵ, which is $(1/r^2)\exp(-2\sqrt{-(2m/\hbar^2)\epsilon}\,r)$. As can be seen, (5) goes faster to zero than the shell model wave function and the substitution $\beta \to 9\beta$, that would correspond to the original strength of the Weizsäcker term [6], would insure precisely the shell model fall-off. In the present work, we have not taken β as a parameter, despite the above mentioned observation, but rather kept the terms (1) as given in the theoretical derivation [7–9]. We are aware that this discussion may be questioned because the expression (1) is not valid beyond the classical turning point. However, as will be seen in what follows, one can take a more practical view and consider (1) and (3) just as a very convenient way of getting solutions that are well behaved over the whole space.

Let us now describe the method we have followed to solve eq. (3). As it stands, it is a highly non-linear differential equation. In order to proceed, we write (3) in the form

$$A(\rho)\rho + B(\rho,\rho')\rho' + C(\rho,\rho')\rho'' = \lambda\rho\,, \qquad (6)$$

where A, B and C are known functions of ρ and ρ'. Eq. (6) can be considered as an eigen-value equation; it is similar to the usual HF equation. It can be solved by an iterative procedure: start from some function $\rho_0(r)$, compute A, B and C with ρ and ρ' replaced by ρ_0 and ρ_0' respectively, integrate (6) with the above mentioned boundary conditions using a method similar to the one described in ref. [12], and iterate. In all cases studied, no problem of numerical instabilities has been found and the convergence is satisfactory. Provided that λ is negative, we always obtain a single solution which happens to be positive definite. The solution of (6) is denoted by ρ_{ITF}, from which τ_{ITF} is constructed through expression (1).

To illustrate the method described, let us now present some results. We leave the neutron ρ_n and proton ρ_p distributions free, apart from the normalisation to the correct number of particles, and include self-consistently the direct Coulomb term (the small exchange one is neglected as in ref. [2]). The spin-orbit force, for simplicity, has also been neglected, although it can be included also in $\tau(r)$ in the same semi-classical way [9]. Instead of solving, as described before, an equation of the form (6), we solve two coupled equations of essentially the same type, producing two eigen-values λ_n and λ_p and two functions $\rho_{\mathrm{ITF,n}}$, $\rho_{\mathrm{ITF,p}}$. The interaction SVI of the Skyrme type has been used [13]. It has been prefered to other because, having an effective mass $m^*(r)$ which is practically constant, it gives rise to an almost local

Table 1
Comparison of the results for the total and kinetic energies per particle and r.m.s. neutron and proton radii obtained using different approximations

	^{40}Ca			^{90}Zr			^{208}Pb		
	ITF	ITF + SC	HF	ITF	ITF + SC	HF	ITF	ITF + SC	HF
E/A (MeV)	−8.17	−7.86	−7.91	−8.46	−7.95	−7.93	−7.64	−7.25	−7.24
E_{kin}/A (MeV)	17.03	16.59	16.24	17.80	17.63	17.43	18.50	18.36	18.20
r_n (fm)	3.32	3.35	3.38	4.29	4.35	4.37	5.63	5.67	5.69
r_p (fm)	3.35	3.40	3.43	4.26	4.27	4.31	5.56	5.56	5.59

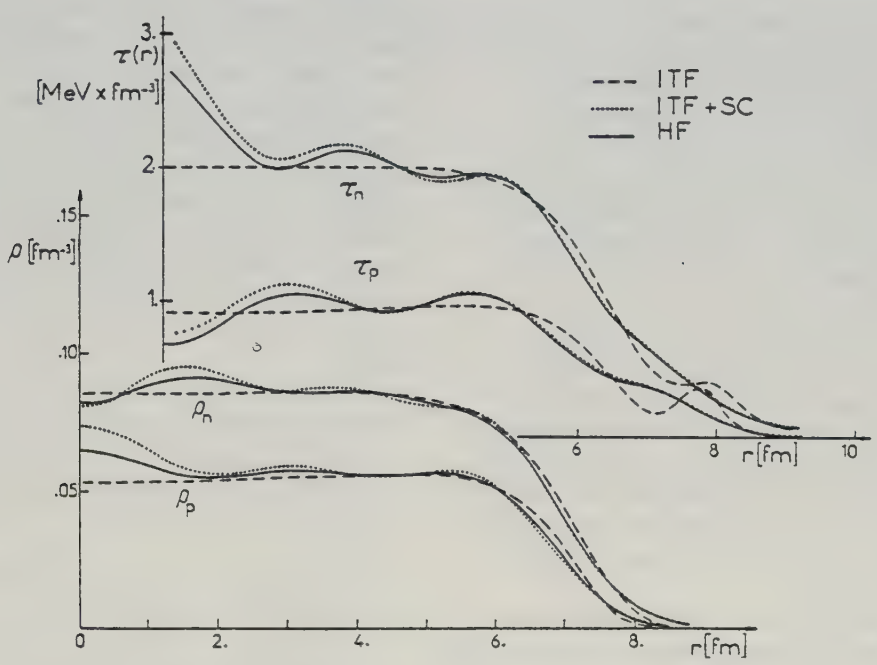


Fig. 1. Comparison of the particle and kinetic energy densities for neutrons and protons in ^{208}Pb, using different approximations.

potential, and the conditions under which expansion (1) has been derived are fulfilled. Otherwise, correction terms [9] depending on $m^*(r)$ and its derivatives should be included in (1).

Results for ^{40}Ca, ^{90}Zr and ^{208}Pb are presented in table 1 and fig. 1; the ones corresponding to the solution of eq. (6) are labelled ITF and for comparison HF results obtained under the same conditions (only direct Coulomb term included, spin-orbit term omitted) are also shown. Concerning the total energy E (see table 1) the ITF approximation can be seen to be good to within 0.5 MeV/particle. Both kinetic and potential energies are overestimated (in absolute value), the net result beeing an overbinding. Consequently, the r.m.s. radii (r_n and r_p) are slightly underestimated. The ITF proton and neutron densities ($\rho_{ITF,p}$ and $\rho_{ITF,n}$) compare rather well with the HF ones, except that the former have a sharper surface and no shell effects. The absence of shell effects is, of course inherent to the semi-classical approach; the sharpness of the surface is directly connected to the value of the constant β in (1). The ITF curve corresponding to the kinetic energy density shows some structure beyond the mean radius; this is essentially due to the term $\Delta\rho$ in (1). Consequently, attention should not be payed to it, because it does not contribute, after integration, to the kinetic energy and its contribution to the potential energy is negligible.

Several ways of improving the procedure described above can be explored. One would be to keep further terms in the expansion of τ [9]. This would presumably lead to a better description of the mean or liquid drop properties, but shell effects would still be missing. We use a different method which, still preserving simplicity, incorporates shell effects (and also effective mass ones). It consists in solving the HF equation [2].

$$\left(-\nabla\cdot\frac{\hbar^2}{2m^*(r)}\nabla+U(r)\right)\phi_i=\epsilon_i\phi_i\,, \qquad (7)$$

where the HF effective mass m^* and the one-body potential U are given functions of ρ and τ (see eqs. (21) and (22a) of ref. [2]), not as a nonlinear equation (requiring iterations) as it is, but as an ordinary Schrödinger equation (no iteration), with m^* and U computed using the functions ρ_{ITF} and τ_{ITF} determined before. This way of proceeding can be viewed essentially as treating $(\tau-\tau_{\mathrm{ITF}})$ as a perturbation and allows to regain the single-particle features lost in the semi-classical treatment.

Results obtained in this way and denoted "improved Thomas–Fermi plus shell corrections" (ITF + SC) are given in table 1 and fig. 1. When compared to the HF results, one can see that the agreement is very good: the energies are very similar, the surface of the densities are almost identical and the shell effects corresponding to the approximate treatment are at the correct place, although small discrepancies in their amplitudes are present.

Having checked its accuracy, let us illustrate the ITF approximation by studying the geometrical configuration of systems having very many nucleons. We restrict ourselves to configurations having spherical symmetry. From arguments based essentially on the Bethe–Weizsäcker mass formula [14], when the mass number increases sufficiently, the spherical configuration having the lowest energy is expected to be a shell (or bubble), because the gain in the Coulomb repulsion will compensate the lost due to the increase of the surface energy. We have solved eq. (6) for systems having $A\simeq 1000$. We give in fig. 2 results corresponding to $^{980}X^{686}_{294}$ which in our approximation is stable against particle-emission as well as β-stable. As can be seen, the lowest spherical solution is a "bubble", with a density close to the nuclear matter saturation density and with one interior and one exterior surfaces that are quite similar. The energy per particle (−3.5 MeV) is of the same order of magnitude as the estimate given by Bethe and Siemens [14]. Shell corrections as described before have also been included and drawn on the figure; they reduce the binding by 0.2 MeV per particle. Of cource, the main question is the stability of this configuration against deformations. Work in this direction is in progress.

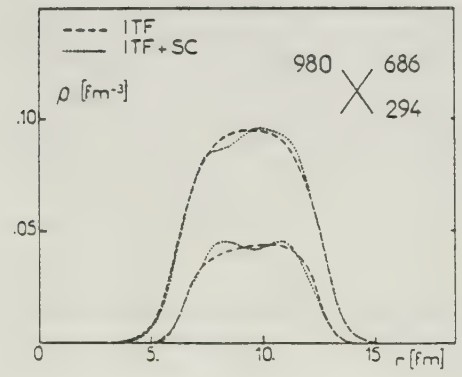


Fig. 2. Neutron and proton densities for a system of $A = 980$ nucleons, using different approximations.

The results presented in this letter are illustrative and serve mainly to check the accuracy of the method proposed. We think that, when applied to more complex problems, the simplification it will introduce may be essential.

We are especially grateful to C. Schmit for his constant interest in this work and for much advise in solving the Euler–Lagrange equations. Thanks are also due to R.K. Bhaduri, B. Jennings, M. Brack and Nguyen and Giai for interesting discussions.

References

[1] T.H.R. Skyrme, Phil. Mag. 1 (1956) 1043.
[2] D. Vautherin, Thesis Orsay 1969;
D. Vautherin and D.M. Brink, Phys. Rev. C5 (1972) 626.
[3] S.A. Moszkowski, Phys. Rev. C2 (1970) 402.
[4] J.W. Negele and D. Vautherin, Phys. Rev. C5 (1972) 1472.
[5] K.A. Brueckner, J.R. Buchler, S. Jorna and R. Lombard, Phys. Rev. 171 (1968) 1188.
[6] C.F. Weizsäcker, Z. Phys. 96 (1935) 431.
[7] D.A. Kirzhnits, Field theoretical methods in many-body systems (Pergamon Press, Oxford 1967) p. 52, see references therein.
[8] B.K. Jennings, Ph. D. Thesis, University of Mc Master (1976).

[9] M. Brack, B.K. Jennings and Y.H. Chu, submitted to Phys. Lett.
[10] R.K. Bhaduri and C.K. Ross, Phys. Rev. Letters 27 (1971) 606.
[11] R.J. Lombard, Ann. Phys. 77 (1973) 380.
[12] G.E. Brown, J.H. Gunn and P. Gould, Nucl. Phys. 46 (1963) 598;
and Nguyen van Giai, private communication.
[13] M. Beiner, H. Flocard, Nguyen van Giai and P. Quentin, Nucl. Phys. A238 (1975) 29.
[14] P.J. Siemens and H.A. Bethe, Phys. Rev. Letters 18 (1967) 704.

A SIMPLE APPROXIMATION TO THE NUCLEAR KINETIC ENERGY DENSITY

H. KRIVINE and J. TREINER
Division de Physique Théorique [1], *Institut de Physique Nucléaire, 91406 Orsay Cédex, France*

Received 20 March 1979
Revised manuscript received 5 June 1979

A new functional of the density and its derivative is proposed for the kinetic energy density and the corresponding Euler equations are solved. Comparisons with Hartree–Fock results show close agreement, particularly for the shape of the density at the surface, for heavy as well as for light nuclei. The surface of a system of 5000 nucleons is studied as an approximation to a semi-infinite medium. The dynamical properties of this functional are tested in the case of the giant monopole resonance and are satisfactory when compared to more microscopic treatments.

In recent years, an increasing interest has been devoted to approximate treatments of Hartree–Fock (HF) calculations. Although the use of schematic effective forces [1] simplifies the calculations, they still remain very involved and may be overdetailed, if one is interested in large systems, or in dynamical studies like the description of giant resonances, or heavy-ion collisions. In the energy density formalism (EDF) [2], one assumes that the energy density H is a functional of the diagonal part of the one-body densities of neutrons and protons, ρ_n and ρ_p, and of their derivatives. Instead of dealing with as many functions as there are single-particle occupied states, one deals with only two functions ρ_q, q = n, p. One then writes down and solves [3] two Euler equations to determine these densities. The construction of the functional can be divided in to two parts: the potential term and the kinetic term.

Concerning the first one, schematic effective interactions have been introduced precisely so that the potential part of the HF hamiltonian density is, for spherical nuclei, a functional of ρ_q and its derivates. In this letter, we shall restrict ourselves to these cases.

The second one is the main object of this letter; our starting point is the following simple remark: the kinetic energy density

$$\tau_q(r) = (\hbar^2/2m) \sum_{i_q} |\nabla \varphi_{i_q}|^2 ,$$

where i_q labels the occupied states φ_{i_q}, is exactly a functional of ρ_q and its derivatives not only in infinite nuclear matter where, as is well known,

$$\tau_q(r) = (\hbar^2/2m)\tfrac{3}{5}(3\pi^2)^{2/3}\rho_q^{5/3} , \qquad (1)$$

but also in ^{4}He, where:

$$\tau_q(r) = (\hbar^2/2m)2|\nabla\varphi_q|^2 = (\hbar^2/2m)\tfrac{1}{4}(\nabla\rho_q)^2/\rho_q . \qquad (2)$$

In eq. (2), $\rho_q = 2|\varphi_q|^2$, and φ_q is the wave function of the only occupied state. This suggests defining modified Thomas–Fermi approximation (MTF) to the kinetic energy density where the functional $\tau_q^{\mathrm{MTF}}(r)$ is also a function of the number of particles A_q, of the following form:

$$\tau_q^{\mathrm{MTF}}(r) = (\hbar^2/2m)(\alpha(A_q)\rho_q^{5/3} + \beta(A_q)(\nabla\rho_q)^2/\rho_q) , \qquad (3)$$

with the conditions $\alpha(2) = 0$, $\alpha_\infty = \frac{3}{5}(3\pi^2)^{2/2}$, $\beta(2) = 1/4$ which assure that eqs. (1) and (2) are satisfied.

The functions $\alpha(A_q)$ and $\beta(A_q)$ could be determined by a fit to an average description of the bulk properties of nuclei throughout the periodic table, which would smooth out shell effects. We have rather used, for simplicity, the following procedure: for a set of systems with equal number of neutrons and protons (A_q = 8, 20, 45, 104), one looks for the

[1] Laboratoire associé au CNRS.

couple of values $\alpha(A_q)$, $\beta(A_q)$ which leads, when solving the Euler equations, to the closest results to the HF ones calculated with the same interaction (no spin–orbit term, no center-of-mass energy correction, use of the equally filling approximation [12] for nuclei with degenerated orbitals not completely filled). One then uses the values obtained for $\alpha(A_q)$ and $\beta(A_q)$ to calculate spherical nuclei (with Coulomb interaction and possibly $N \neq Z$) and compares with the HF results (no Coulomb exchange term).

The comparison is made in table 1: energies per particle, kinetic energies per particle, mean square radii agree within less than 1% for the energies and within less than 0.2% for the radii, for small as well as for large systems. One should note that such an accuracy will not hold (yet being of the order of the shell effects) for non-magnetic nuclei, especially for light nuclei where shell effects are maximum. But if one is interested in describing shell effects, one can use expression (3) to get a zero-order approximation and then treat, as proposed in ref. [3], shell effects as a perturbation.

In fig. 1 are plotted the densities and the kinetic energy densities of protons calculated in ^{16}O and ^{208}Pb. One can see that the surface shapes are correctly reproduced. In order to make some quantitative comparisons, we have calculated the surface thickness a of protons densities using the definition proposed by Campi in ref. [4]: $a = [6R_k(\mathrm{d}R_k/\mathrm{d}k)]^{1/2}\pi^{-1}$ where $R_k = \{[k+3)/2]\langle r^k\rangle\}^{1/k}$ are the moments of the density. When the density is exactly a Fermi distribution one recovers the usual definition of surface thickness (the 10%–90% variation in ρ corresponds to 4.4 a). One can see in table 1 that the agreement with the HF values is better than 5%.

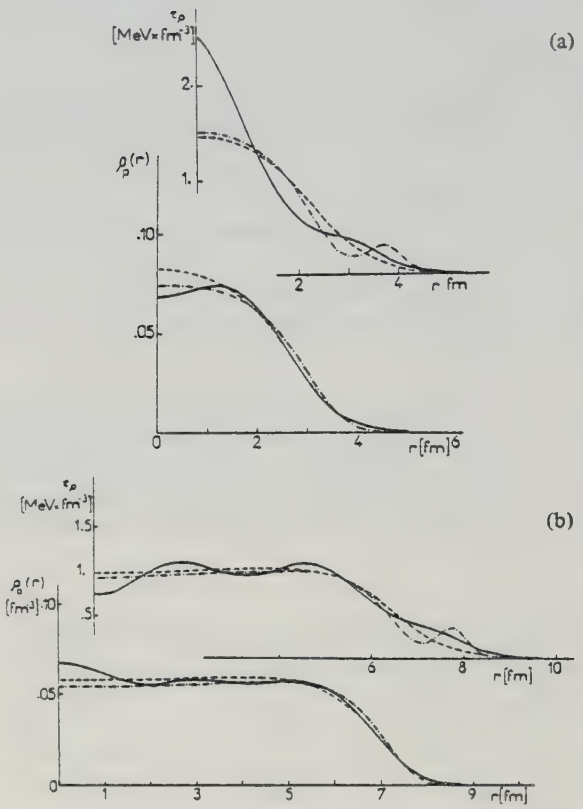


Fig. 1. Proton density and kinetic energy density plotted for ^{208}Pb (b) and ^{16}O (a). Full line, dashed line and dashed–dotted line correspond, respectively, to HF, MTF and ITF results.

We have plotted in fig. 2 the function $\alpha(A_q)/\alpha_\infty$. It can be seen that although this function is very rapidly increasing in the region $A_q \lesssim 10$, even in the

Table 1
Total energy per particle E/A, kinetic energy per particle T/A, neutron and proton radii r_n and r_p, neutron and proton surface thicknesses a_n and a_p in ^{16}O, ^{40}Ca, ^{90}Zr and ^{208}Pb, using the ITF, MTF and HF approximations with SIII interaction [9].

	^{16}O			^{40}Ca			^{90}Zr			^{208}Pb		
	ITF	MTF	HF	ITF	MTF	HF	ITF	MTF	HF	ITF	MTF	HF
E/A	−7.03	−6.81	−6.87	−8.14	−7.90	−7.93	−8.45	−7.95	−7.93	−7.64	−7.22	−7.23
T/A	15.93	14.58	14.89	17.06	16.03	16.27	17.84	17.13	17.42	18.49	17.91	18.15
r_n	2.55	2.64	2.65	3.31	3.37	3.38	4.29	4.36	4.37	5.64	5.17	5.70
r_p	2.57	2.67	2.68	3.35	3.42	3.43	4.25	4.30	4.30	5.55	5.56	5.57
a_n	0.33	0.43	0.45	0.35	0.46	0.47	0.39	0.52	0.48	0.42	0.58	0.55
a_p	0.33	0.44	0.46	0.35	0.47	0.48	0.35	0.47	0.49	0.32	0.46	0.44

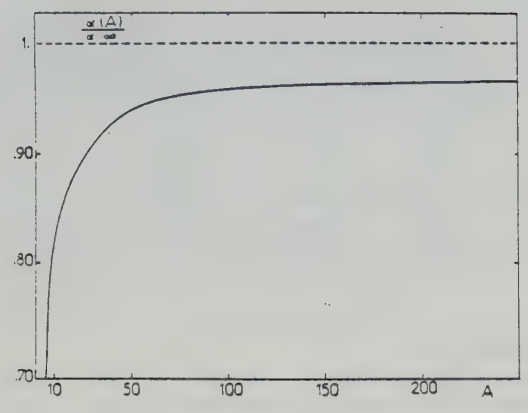


Fig. 2. Plot of the function $\alpha(A)/\alpha_\infty$. It can be roughly parametrized by the expression $\alpha(A)/\alpha_\infty = \tanh 7746\ (A-2)^{1/5}$.

lead region ($A_q \sim 100$) it differs from the asymptotic value by an amount of ~4%. Thus the contribution to the total kinetic of the $\rho_q^{5/3}$ term is sensitively less than what the TF approximation gives, in which $\alpha = \alpha_\infty$ and $\beta = 0$.

The function $\beta(A_q)$ is found to be rapidly varying from the value $\frac{1}{4}$ for $A_q = 2$ to a value which is smaller independent of the nucleons as soon as $A_q \gtrsim 8$ and dependent on the interaction. We shall briefly analyze these three points.

(i) For a system consisting of one occupied state (^{4}He) or in the asymptotic region ($r \to \infty$) of a larger nucleus where a shell model density ρ_q^{SM} is also determined by only one wave function, namely that of the last occupied state, the fall off of the density is given by

$$\rho_q^{\mathrm{SM}}(r) \underset{r\to\infty}{\sim} r^{-2} \exp\{-2[-(2m/\hbar^2)\lambda_q]^{1/2} r\}\,, \qquad (4)$$

where λ_q is the one-particle separation energy. On the other hand, it can be shown [3] that the Euler equations using a form like that of eq. (3) for $\tau_q(r)$, lead to the following behaviour of the density in the asymptotic region:

$$\rho_q^{\mathrm{MTF}}(r) \underset{r\to\infty}{\sim} r^{-2} \exp\{-[-(2m/\hbar^2)(\lambda_q/\beta)]^{1/2} r\}\,. \qquad (5)$$

Eq. (5) obviously coincides with eq. (4) if one sets $\beta = 1/4$ (which is another way to state that eq. (2) is valid). But if β determines the asymptotic behaviour of the density, once can see numerically that it also governs the shape of the external part of the surface. In this region, the decrease of $\rho_q^{\mathrm{SM}}(r)$ is greater than what eq. (4) gives, as all occupied states contribute to the density. Thus good agreement between $\rho_q^{\mathrm{SM}}(r)$ and $\rho_q^{\mathrm{MTF}}(r)$ in the external part of the surface requires a smaller value of β than $\beta = 1/4$. Thus we rather prefer to abandon a theoretical asymptotic limit in a region where there is practically no matter in order to obtain a correct surface shape.

(ii) That we find a constant value for $\beta(A_q)$ ($A_q \gtrsim 8$) is related to the well-known fact that the surface thickness is roughly the same in all nuclei.

(iii) The shape of $\rho_q^{\mathrm{SM}}(r)$ in the outer part of the surface depends on the density of states near the Fermi level. Thus we expect β to depend on the interaction merely through the effective mass m^*/m. We have checked that the value $\beta = 1/9$, which is in agreement with that of Wilets [5], gives a good overall fit for different schematic interactions, provided that their effective mass is near the value 75. A more detailed study (using the Skyrme forces SII, SIII, SV, SVI [9], the Köhler forces Ska, Skb [10] and the KT force [7] which cover a range of values of m^*/m from 0.38 to 0.95) shows a roughly linear dependence between β and m^*/m of the form:

$$\beta = \tfrac{1}{9}\,[m^*/m + \tfrac{1}{4}]\,.$$

On the contrary, the function $\alpha(A_q)$ does not depend on the potential.

It is worthwhile to compare the results of the present paper to those obtained when one uses, for $\tau_q(r)$, the functional derived from the semi-classical approaches [6]:

$$\tau_q^{\mathrm{ITF}}(r) = \frac{\hbar^2}{2m}\left(\alpha_\infty \rho^{5/3} + \frac{1}{36}\frac{(\nabla\rho)^2}{\rho} + \frac{1}{3}\Delta\rho + \frac{1}{6}\frac{\nabla f_q}{f_q}\nabla\rho_q + \frac{1}{6}\rho_q\frac{\Delta f_q}{f_q} - \frac{1}{12}\rho_q\frac{(\nabla f_q)^2}{(f_q)^2}\right), \qquad (6)$$

where $f_q = (m/m^*)_q$.

The effect of the last three terms, when solving the Euler equations, is found to decrease binding energies, radii and surface thicknesses by less than 1% in the case of the SIII force and by around 5% in the case of the SV force, which has $m^*/m = 0.38$ in nuclear matter.

The densities, labelled ρ_q^{ITF}, are reproduced in fig. 1: the too small value of β leads to too sharp a surface and consequently too small a surface thickness (see table 1). Indeed, it is known that the semi-classical expansion (6) is not valid beyond the turning point

Table 2
Incompressibility modulus, effective mass and surface thickness in $^{2500}_{2500}$X calculated with various Skyrme interactions [9], the Köhler force Ska [10] and the SkM force [7].

	SV	SIV	SII	SIII	SVI	Ska	SkM
K (MeV)	306	325	342	356	364	263	220
m^*/m	0.38	0.47	0.58	0.76	0.95	0.61	0.79
a (fm)	0.73	0.67	0.62	0.57	0.55	0.68	0.68

and this is certainly why the densities are not satisfactory at the surface.

As an illustration, we shall now use the MTF functional in two different physical situations: (i) a very large system (5000 nucleons), (ii) the monopole resonance of nuclei.

The functional (3) is well suited to the study of very large systems because it is found that with all the above mentioned forces, the radii and surface thicknesses are rather insensitive to the precise value of β. Calculation of a system of 2500 protons and neutrons (without Coulomb forces) is a good approximation to a semi-infinite medium; it shows that a variation of 50% of β induces a variation of 8% on the surface thickness a and of 1% on the radii. This is in agreement with the study of Campi and Stringari [11] which give an approximated expression for a as a function of β and the parameter of the interaction. Thus one can study, with this MTF procedure the gross effects of the interaction on the diffuseness. As an example, we give in table 2 the values of the diffuseness a for various schematic forces in the nucleus $^{2500}_{2500}$X. The role of the two important parameters, m^*/m and the incompressibility K, is not very clear. Nevertheless, it seems that for a given effective mass, the surface thickness decreases when K increases and that for a given K, a is rather insensitive to m^*/m when m^*/m is not too small.

Finally, we have tested the dynamical properties of the functional (3) in a simple case (monopole isoscalar vibration), following a fluid dynamical method proposed in ref. [7]. Table 3 gives the results of three self-consistent calculations [‡1]. One can see that the agreement between MTF and RPA is very satisfactory.

[‡1] The discrepancy between these values and the experimental data is analyzed in ref. [7]. Here we only want to compare the theoretical approaches.

Table 3.
Energy of the giant monopole resonance in ^{208}Pb; comparison between a fluid dynamical calculation using the ITF of MTF approximation and the RPA result.

ITF [7]	MTF	RPA [8]
19.6	17.7	17.9

The origin of the discrepancy between ITF and MTF is twofold: (i) The compressibility of the nucleus, which is related to the second variation of the hamiltonian with respect to the densities, is of course modified if one changes the functional used for $\tau_q(r)$. (ii) The differences in the shape of the equilibrium densities ρ_q^{ITF} and ρ_q^{MTF} also play a certain role in the determination of the energy of the resonance. It can be shown [7] that (i) is the most important factor. This favors the use of the functional (3) for practical calculations as it allows a completely self-consistent fluid dynamical treatment.

The (empirical) functional (3) has to be understood microscopically. Work in this direction is in progress, using one-dimensional simplified models.

We are grateful to O. Bohigas, X. Campi and S. Stringari for fruitful discussions.

References

[1] T.H.R. Skyrme, Phil. Mag. 1 (1956) 1043;
D. Vautherin, Thesis, Orsay (1969);
D. Vautherin and D.M. Brink, Phys. Rev. C5 (1972) 626;
S.A. Moszkowski, Phys. Rev. C2 (1970) 405;
J.W. Negele and D. Vautherin, Phys. Rev. C5 (1972) 1472.

[2] K.A. Brueckner, H.R. Buchler, S. Jorna and R. Lombard, Phys. Rev. 171 (1968) 1188;
M. Oworzecka and S. Moszkowski, Phys. Rev. C2 (1975) 619.

[3] O. Bohigas, X. Campi, H. Krivine and J. Treiner, Phys. Lett. 64 (1976) 381.
[4] X. Campi, Proc. Intern. Conf. on Nuclear self-consistent fields, eds. G. Ripka and M. Porneuf (North-Holland, 1975).
[5] L. Wilets, Rev. Mod. Phys. 30 (1958) 542.
[6] D.A. Kirzhnits, Field theoretical methods in many-body systems (Pergamon, Oxford, 1967) p. 52;
B.K. Jennings, Ph. D. Thesis, Univ. of McMaster (1976);
Y.H. Chu, B.K. Jennings and M. Brack, Phys. Lett. 68B (1977) 407;
R.K. Bhaduri and C.K. Ross, Phys. Rev. Lett. 27 (1971) 606.
[7] H. Krivine, J. Treiner and O. Bohigas, IPNO/TH 78-42, Orsay.
[8] J. Martorell, O. Bohigas, S. Fallieros and A.M. Lane, Phys. Lett. 60B (1976) 313.
[9] M. Beiner, H. Flocard, Nguyen Van Giai and P. Quentin, Nucl. Phys. A238 (1975) 29.
[10] H.S. Köhler, Nucl. Phys. A258 (1976) 301.
[11] X. Campi and S. Stringari, private communication.
[12] W.H. Bassichis and A.K. Kerman, Phys. Rev. C2 (1970) 1768.

Nuclear Physics A351 (1981) 269–284; © *North-Holland Publishing Co., Amsterdam*
Not to be reproduced by photoprint or microfilm without written permission from the publisher

SELF-CONSISTENT DESCRIPTION OF NUCLEAR LEVEL DENSITIES

M. BARRANCO

*Division de Physique Théorique *, Institut de Physique Nucléaire, F-91406 Orsay Cedex, France*
and
Department of Physics, University of Florida, Gainesville, USA

and

J. TREINER

*Division de Physique Théorique *, Institut de Physique Nucléaire, F-91406 Orsay Cedex, France*

Received 25 April 1980
(Revised 15 July 1980)

Abstract: We present a self-consistent calculation of the nuclear level density based on a generalization to finite temperature of a modified Thomas-Fermi method. A simple expression is derived for the so-called level density parameter a entering the expression of the density of states $\rho(E) = E^{-5/4} \exp [2\sqrt{aE}]$ and relating the excitation energy to the temperature $E = aT^2$, in terms of nucleon equilibrium densities at $T = 0$ only. One thus avoids the difficulty of adding external constraints to calculate isolated nuclei at finite temperature which are shown to be unstable against particle emission. The role of the nuclear surface is discussed. It is shown that the effective mass of the interaction plays a crucial role in determining the value of a and comparison with experiment confirms the vale $m^*/m \gtrsim 1$ near the Fermi level obtained through more microscopic analysis.

1. Introduction

It is known that the great number of closely spaced energy levels in excited nuclei allows for a statistical description of the average nuclear level density [1]. The result is an exponentially increasing number of states with excitation energy, $\rho(E^*) = E^{*-5/4} \exp 2\sqrt{aE^*}$ where the so-called level density parameter a can be obtained from the low-temperature expansion $E^*(T) = E(T) - E(0) = aT^2$. In the limit of a very large system, the Landau theory of Fermi liquids gives a value of the parameter $a = \frac{1}{4}\pi^2\, 2m^*A/\hbar^2 k_f^2$, where k_F is the Fermi momentum and A the number of nucleons. If the effective mass m^* is taken equal to the bare mass and $k_F = 1.33$ fm^{-1}, one obtains $a = \frac{1}{15}A$ MeV^{-1}, while comparison with nuclear level densities extracted from experimental data leads to a value of $a = \frac{1}{8}A$ MeV^{-1} [ref. [2])].

* Laboratoire associé au CNRS.

Among others, the effect of the nuclear surface is certainly important, as the local Fermi momentum is much lower in the surface region than in the interior of the nucleus.

The difficulty in calculating the level density parameter from the low temperature expansion lies in the fact that an isolated nucleus is not stable against heating. Thus one has to make use of additional constraints on the system in order to maintain the nucleons in a finite box at $T \neq 0$, with a possible dependence on the constraints used.

In the present paper, we derive a simple expression for the level density parameter in which only equilibrium nucleons densities at $T = 0$ enter. Thus one avoids the above mentioned difficulty. The method used (sect. 2) is a generalization to finite temperature of the modified Thomas-Fermi (MTF) approximation, which has been shown to give bulk properties of cold spherical nuclei, and particularly surface properties, in excellent agreement with Hartree-Fock results [3]). The asymptotic behaviour of the solutions of the Euler equations is studied. In sect. 3, we give a systematic study of the level density parameter using different effective forces of Skyrme type and different kinetic energy density functionals. The role of the surface thickness appears clearly. It is shown that among the parameters characterizing the effective interaction, the effective mass m^*/m is particularly important. Comparison with values extracted from experimental data then shows that one should take into account the energy dependence of m^*/m, which increases its value in the vicinity of the Fermi surface up to $\gtrsim 1$. Some consequences of the present results are drawn for astrophysical applications.

2. The thermal MTF approximation

2.1. THE METHOD

A brief sketch of the thermal HF (THF) procedure with a Skyrme interaction will be useful to present our method. We shall restrict ourselves to interactions of Skyrme type [13]), which give rise to an interaction energy density depending on the nucleon densities and their derivatives only (for spherical systems).

In the THF approximation, one minimizes the total energy of the system with respect to single-particle wave functions imposing the constraint that the temperature be given, i.e. one minimizes the total free energy:

$$F = \int \mathcal{F} \mathrm{d}\boldsymbol{r} = \int (\mathcal{H} - T \sum_q S_q) \mathrm{d}\boldsymbol{r} \qquad q = \mathrm{n}, \mathrm{p}, \tag{1}$$

where $\mathcal{H}$ is the hamiltonian density which depends only on the nucleons densities ρ_n and ρ_p and on the kinetic energy densities τ_n and τ_p. $S_n(S_p)$ stands for the entropy of neutrons (protons). In the limit of a Fermi gas of independent particles, S_q can be

written (if one expresses T in energy units)

$$S_q = -\sum_\alpha n_\alpha^q \log n_\alpha^q + (1-n_\alpha^q)\log(1-n_\alpha^q), \tag{2}$$

and the occupation numbers n_α^q are given by:

$$n_\alpha^q = \frac{1}{1+\exp(\varepsilon_\alpha^q - \mu_q)/T}\ , \tag{3}$$

where the chemical potential μ_q of particles q is determined by the normalization condition:

$$\sum_\alpha n_\alpha^q = A_q, \tag{4}$$

$A_q = N, Z$ being the number of particles q.

The densities ρ_q, the kinetic energy densities and the single-particle states ε_α^q are defined by:

$$\rho_q = \sum_\alpha |\phi_\alpha^q|^2 n_\alpha^q, \tag{5}$$

$$\tau_q = \sum_\alpha |\nabla\phi_\alpha^q|^2 n_\alpha^q, \tag{6}$$

$$\left(-\vec{\nabla}\frac{\hbar^2}{2m_q^*}\vec{\nabla} + U^q\right)\phi_\alpha^q = \varepsilon_\alpha^q \phi_\alpha^q, \tag{7}$$

where ϕ_α^q are the single-particle wave functions. In eq. (7) the HF potential and the effective mass m_q^* are given by:

$$U^q = \frac{\hat{c}\mathcal{H}}{\hat{c}\rho_q} - \vec{\nabla}\frac{\hat{c}\mathcal{H}}{\hat{c}\vec{\nabla}\rho_q}, \tag{8}$$

$$\frac{\hbar^2}{2m_q^*} = \frac{\hat{c}\mathcal{H}}{\hat{c}\tau_q}. \tag{9}$$

The usual thermal TF approximation is derived from eqs. (1)–(9) through a local density approximation: one approximates the local density $\rho q(r)$ by a piece of nuclear matter with the same density: the states $\phi^q(r)$ are then just taken as plane waves of momentum k. One keeps in $U_q(r)$, only that part $V_q(r)$ with no gradient terms and replaces the discrete sums by integrals over k. The following equations are then obtained:

$$\varepsilon_q(k) = \frac{\hbar^2}{2m_q^*}k^2 + V_q, \tag{10}$$

$$\rho_q(r) = \frac{1}{2\pi^2}\left(\frac{2m_q^* T}{\hbar^2}\right)^{\frac{3}{2}} J_{\frac{1}{2}}(\eta_q), \tag{11}$$

$$\tau_q(r) = \frac{1}{2\pi^2}\left(\frac{2m_q^* T}{\hbar^2}\right)^{\frac{3}{2}} J_{\frac{1}{2}}(\eta_q), \tag{12}$$

$$\eta_q = \frac{1}{kT}(\mu_q - V_q), \tag{13}$$

$$J_\nu(\eta) = \int_0^\infty \frac{x^\nu dx}{1+\exp(x-\eta)}, \tag{14}$$

$$S_q = \frac{5}{3}\frac{\hbar^2}{2m_q^*}\frac{\tau_q}{T} - \eta_q \rho_q. \tag{15}$$

Eqs. (11) and (12), in the limit $T \to 0$, give the usual TF functional $\tau_q(r) = \frac{3}{5}(3\pi^2)^{2/3}\rho_q^{5/3}$. Instead of this, we want to recover, in the same limit, the MTF functional, which is written [3]):

$$\tau_q(r) = \alpha(A_q)\rho_q^{5/3} + \beta(\nabla\rho_q)^2/\rho_q, \tag{16}$$

with

$$\alpha(A_q) = \alpha(\infty)\tanh\sqrt{\tfrac{3}{5}}(A_q - 2)^{1/5}, \tag{17.a}$$

$$\alpha(\infty) = \tfrac{3}{5}(3\pi^2)^{2/3},$$

$$\beta = \frac{1}{9}\left(\frac{m^*}{m} + \frac{1}{4}\right), \tag{17.b}$$

where m^*/m is the value of the effective mass at the saturation point of symmetric nuclear matter. Thus one is lead to state that the volume term of τ_q, τ_q^ν is to be written as:

$$\tau_q^\nu = \tau_q - \beta\frac{(\nabla\rho_q)^2}{\rho_q} = \frac{\alpha(A_q)}{\alpha(\infty)}\frac{1}{2\pi^2}\left(\frac{2m_q^* T}{\hbar^2}\right)^{\frac{3}{2}} J_{\frac{1}{2}}(\eta_q). \tag{18}$$

Eq. (15) is no longer consistent with (18). It can be shown that the following expression:

$$S_q = \frac{5}{3}\frac{\hbar^2}{2m_q^*}\frac{1}{T}\left(\tau_q - \beta\frac{(\nabla\rho_q)^2}{\rho_q}\right) - \eta_q\rho_q\frac{\alpha(A_q)}{\alpha(\infty)} \tag{19}$$

is the only one that fulfills the two conditions: (i) $S_q(T) \to 0$ as $T \to 0$, (ii) the low temperature expansion of the total energy as well as the total free energy (see sect. 3) involves the same constant a, i.e.:

$$F(T) = E(T) - TS(T) = E(o) - aT^2, \tag{20a}$$

$$E(T) = E(o) + aT^2. \tag{20b}$$

(Eq. (20b) is obtained from (20a) if one uses the thermodynamical relation $S = -\partial F/\partial T$.)

Eqs. (11) and (18) give the desired functional relation between τ_q and ρ_q at a given temperature. For a given value of $\rho_q(r)$, one inverts eq. (11) to get the local value of η_q and inserts it into eq. (19) to obtain the corresponding $\tau_q(r)$. The total free energy is now a functional of ρ_q and its derivatives, provided one assumes that the potential part does not depend explicitly on the temperature.

The equilibrium condition for the system is:

$$\frac{\partial \mathcal{F}}{\partial \rho_q} - \vec{\nabla} \frac{\partial \mathcal{F}}{\partial \vec{\nabla} \rho_q} = \lambda_q \tag{21}$$

where λ_q is the Lagrange multiplier corresponding to the conservation of the number of nucleons and is interpreted as the chemical potential.

2.2. ON THE VALIDITY OF THE APPROXIMATIONS MADE

The assumption, usually made, that the potential part of the hamiltonian does not depend explicitly on the temperature (but only implicitly through the dependence of $\rho_q(T)$) may be valid up to a few MeV if the interaction used reproduces in a satisfactory way the single-particle spectrum of the nucleus. Indeed this is possible, if Skyrme interactions are used, for which case neglecting a possible T-dependence may not be too restrictive, provided one takes into account some energy dependence of the effective mass near the Fermi level [4]). This question will be discussed in more detail in sect. 3. For a more detailed analysis of the temperature dependence of the interaction, we refer the reader to ref. [21]) and references therein.

Let us note also that the approximation made in deriving eqs. (1)–(9) are valid if T is greater than the spacing of the level near the Fermi energy, in which case one can replace discrete sums by integrals. But one expects this local density approximation to be less adequate in systems with a small number of particles than in heavy nuclei (although the MTF functional takes partially into account the size of the system). In small nuclei as well as at very low temperature, the spacing of the levels cannot any more be neglected. Indeed, eqs. (2) and (3) themselves are no longer valid [5]) and one has to go back to the exact partition function to describe a finite system at very low temperature; obviously in this situation, a TF approximation cannot be used. Nevertheless one is allowed to make a low-temperature expansion in order to extract the level density parameter, as one wants to describe a domain in temperature where the heat capacity of the nucleus is linear in T.

2.3. ASYMPTOTIC BEHAVIOUR OF THE SOLUTIONS

We now show that the Euler equations (21) have no physically acceptable solutions that vanish for large r, i.e. that an isolated nucleus is not stable against particle emission when it is given external energy.

For simplicity in the discussion, we shall consider only one kind of particle and put

$\alpha(A_q) = \alpha(\infty)$ in eq. (18). The free energy density $\mathscr{F}$ has then the following form:

$$\mathscr{F} = \frac{\hbar^2}{2m^*}\tau^{\nu} + \frac{\hbar^2}{2m}\beta\frac{(\nabla\rho)^2}{\rho} + P(\rho) + b(\nabla\rho)^2 - T\left(\frac{5}{3}\frac{\hbar^2}{2m^*}\frac{\tau}{T} - \eta\rho\right), \tag{22}$$

where $P(\rho)$ is an algebraic function of ρ which goes like ρ^2 for small ρ if one uses a Skyrme interaction. Eq. (21) becomes:

$$-\frac{2}{3}\frac{\hbar^2}{2m^*}\frac{\partial\tau}{\partial\rho} + T\left(\eta + \rho\frac{\partial\eta}{\partial\rho}\right) + \frac{\partial P}{\partial\rho} + \frac{\hbar^2}{2m}\beta\left[\left(\frac{\nabla\rho}{\rho}\right)^2 - 2\frac{\Delta\rho}{\rho}\right] - 2b\Delta\rho = \lambda. \tag{23}$$

We look for solutions that become small for large r. From eqs. (11) and (14) one finds that η must be large and negative. Expanding the Fermi integrals in powers of e^{η} and keeping the leading term leads to:

$$\rho \sim \tfrac{1}{2}e^{\eta}(2m^*T/\pi\hbar^2)^{\frac{3}{2}}, \tag{24}$$

so that

$$\partial\eta/\partial\rho = 1/\rho, \tag{25}$$

$$\tau \sim \tfrac{3}{4}\pi\left(\frac{2m^*T}{\pi\hbar^2}\right)^{\frac{3}{2}}e^{\eta} = \frac{3}{2}\frac{2m^*T}{\hbar^2}\rho. \tag{26}$$

Then

$$\eta \sim \eta_0 + \log\rho, \qquad \eta_0 = \log 2\left(\frac{\pi\hbar^2}{2m^*T}\right)^{\frac{3}{2}}, \tag{27}$$

and eq. (23), if one keeps only the leading terms, becomes:

$$T(\eta_0 + \log\rho) + \frac{\hbar^2}{2m}\beta\left[\left(\frac{\nabla\rho}{\rho}\right)^2 - 2\frac{\Delta\rho}{\rho}\right] = \lambda. \tag{28}$$

We show in the appendix that if no extra constraint is put on the system, then eq. (28) has no physically acceptable solution. For instance, it is clear that there are solutions which become constant for large r. The derivative terms can then be neglected and one gets:

$$\rho \sim e^{\lambda/T - \eta_0} = \tfrac{1}{2}(2m^*T/\hbar^2)^{\frac{3}{2}}e^{\lambda/T}. \tag{29}$$

But of course this solution cannot be normalized in the whole r-space. This corresponds to the fact, previously noted [6]), that an isolated nucleus is not stable against heating. Nucleons drip out of the nucleus as soon as they are given external energy. This is of course related to the fact that the model is a static one and does not allow one to discuss the difference between the time of thermalization and the time of emission of particles. As the latter is greater than the former, one can partially separate the two processes; a static calculation can thus give information on the thermalization but provided that the constraint put on the

system in the calculation is derived in a theory where both effects are incorporated, and not determined by numerical purposes. For example, the solution with the asymptotic behaviour given by eq. (29) calculated in a finite box will depend on the size of the box, i.e. will depend on the additional constraint – that can be interpreted as an external pressure – implicitly incorporated in the calculation. We have found that evaluating numerically the level density parameter via the low temperature expansion,

$$F(T) = F(0) - aT^2,$$

gives values which vary by as much as 20 % in ^{208}Pb when the size of the box goes from 13 fm to 16 fm. At very low temperatures, ($T \sim 0.1$ MeV) where one would expect the size of the box to be less important, substracting two nearly equal quantities leads to very poor accuracy. For higher values of T, the asymptotic behaviour is no longer negligible. We shall show in the next section that the parameter a can be obtained in a very simple and accurate manner as a function of equilibrium densities at $T = 0$. Let us note as a final remark that the nucleon drip is also seen in thermal HF calculations, which cannot be performed in r-space because of the partial filling of the continuum states. Use is made of a basis – with the delicate problem of the truncature [7]).

3. Level density parameter

3.1. LOW TEMPERATURE EXPANSION

One can see, from the asymptotic expansion of the Fermi integrals $J_\nu(\eta)$ when $T \sim 0$,

$$J_{\frac{1}{2}}(\eta) \sim \tfrac{2}{3}\eta^{\frac{3}{2}}(1 + \pi^2/8\eta^2), \tag{31a}$$

$$J_{\frac{3}{2}}(\eta) \sim \tfrac{2}{5}\eta^{\frac{5}{2}}(1 + 5\pi^2/8\eta^2), \tag{31b}$$

that the corrective terms to the density and the kinetic energy density behave as T^2. Thus we write:

$$\rho_q(T) = \rho_q^0 + \delta\rho_q T^2, \tag{32}$$

where ρ_q is the equilibrium density at $T = 0$ and $\delta\rho_q$ satisfies the condition

$$\int \delta\rho_q \mathrm{d}\boldsymbol{r} = 0, \tag{33}$$

in order to preserve the number of particles. Then one can use (31a) to get η_q in terms of ρ_q and T and insert it into eqs. (18) and (19). The volume term of the kinetic

energy then becomes:

$$\tau_q^v = \frac{3}{5}\frac{\alpha(A_q)}{\alpha(\infty)}(3\pi^2)^{2/3}\rho_q^{5/3} + \delta\tau_q^v T^2,$$
$$\delta\tau_q^v = \tfrac{1}{12}\frac{\alpha(A_q)}{\alpha(\infty)}\left(\frac{2m^*}{\hbar^2}\right)^2 (3\pi^2\rho_q)^{\frac{1}{3}}. \tag{34}$$

Next, the total free energy density $\mathcal{F}$ is expanded in powers of T^2:

$$\mathcal{F}(T, \boldsymbol{r}) = \mathcal{H}(\rho_n, \rho_p) + \sum_q \left.\frac{\delta\mathcal{H}}{\delta\rho_q}\right|_{\rho_q^0} \delta\rho_q T^2 + \sum_q \frac{\hbar^2}{2m_q^*}\delta\tau_q^v T^2 - T^2 \sum_q \lim_{T\to 0}\left(\frac{S_q}{T}\right). \tag{35}$$

When integrated over $\boldsymbol{r}$, the second term of the r.h.s. vanishes as one can replace $\delta\mathcal{H}/\delta\rho_q$ by λ_q and make use of eq. (33). Finally one can write for the total free energy and for the total energy:

$$F(T) = \int \mathcal{F}(T, \boldsymbol{r})\mathrm{d}\boldsymbol{r} = E(0) - aT^2, \tag{36a}$$

$$E(T) = \int \mathcal{H}(T, \boldsymbol{r})\mathrm{d}\boldsymbol{r} = E(0) + aT^2, \tag{36b}$$

with

$$a = \tfrac{1}{4}\pi^2 \sum_q \frac{\alpha(A_q)}{\alpha(\infty)} \int \rho_q(r)\frac{2m_q^*}{\hbar^2 k_{F_q}^2(r)}\,\mathrm{d}\boldsymbol{r}, \tag{37}$$
$$k_{F_q}(r) = [3\pi^2\rho_q(r)]^{\frac{1}{3}}.$$

Before discussing the results, one can make the following remarks:

(i) The parameter a appears as the mean value of the local inverse effective Fermi kinetic energy over the nucleus. It is then very sensitive to the shape of the surface, where the local k_F is of course much lower than in the interior of the nucleus. The integral in eq. (37) converges very slowly (as the integrand goes like $r^2\rho^{\frac{1}{3}}$); for instance the most external nucleon contributes to as much as 20 % to the value of a in ^{208}Pb and 50 % in ^{40}Ca. In this semi-classical model, it is the external nucleons which contributes most to the specific heat. The same conclusion can be seen in ref. [12]).

(ii) The limit of eq. (37) in an infinitely large system gives the correct value of the level density parameter in Landau's theory of Fermi liquids [8]):

$$\lim_{A\to\infty}\frac{a}{A} = \tfrac{1}{4}\pi^2\frac{2m^*}{\hbar^2 k_F^2}. \tag{38}$$

(iii) We notice the remarquably simple result that in a finite nucleus, the TF level density parameter does not depend explicitly on the effective interaction but through the effective mass m^*, such as is the case when dealing with an infinite system.

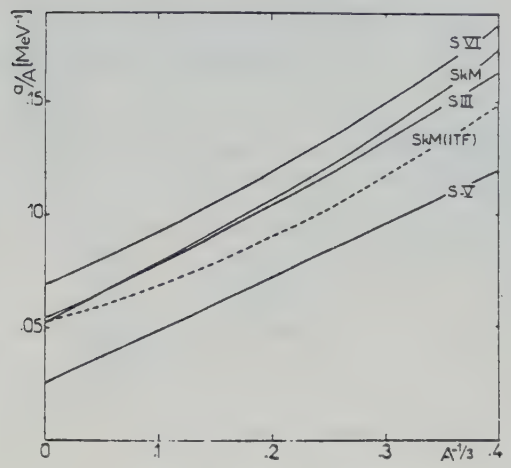


Fig. 1. Plot of the curve a/A as a function of $A^{-1/3}$ for various interactions. Coulomb interaction has not been included in the calculation. The dashed curve is obtained with interaction SkM using the ITF functional of ref. [10]).

3.2. RESULTS AND DISCUSSION

3.2.1. Influence of the kinetic energy functional and comparison with other calculations. We first compare the results obtained with the MTF functional [eq. (16)] with those calculated with the functional, labelled ITF, derived from semi classical expansions [10]). The comparison can be seen in fig. (1) where the two curves a/A are plotted as a function of the mass number A using the same effective interaction SkM [ref. [11])]. This interaction gives satisfactory results for bulk properties of nuclei as well as for electric giant resonances. The Coulomb interaction has been not included here in order to have a smooth curve going from light nuclei to infinite systems. (The effect of Coulomb interaction on a will be discussed in subsect. 3.2.2). One can see that the discrepancy of about 20 % on the absolute value of the ratio a/A is due to the change in the mean slope of the curve. If one writes:

$$\frac{a}{A} = a_v + a_s A^{-\frac{1}{3}} + a_c A^{-\frac{2}{3}},$$

where a_v, a_s and a_c represent, respectively, the volume, surface and curvature parameters, we see in table 1 that the surface coefficient in the MTF calculation is $\sim$ 80 % larger than the ITF one (this has been checked for all interactions used). The reason for this is that the ITF equilibrium densities have smaller surface thicknesses than MTF ones [3, 9]). This reduces the contribution of the surface to the level density parameter. The effect of the shape of the surface can be simply analysed if one notices, from eq. (37), that only the gross features, and not the details, of the equilibrium densities should determine the value of a. If one replaces the calculated densities

TABLE 1

Values of volume, surface and curvature terms a_v, a_s and a_c of eq. (39) for various effective interactions

	a_v	a_s	a_c	m^*/m	K (MeV)
SV	0.026	0.224	0.039	0.38	306
SIII	0.054	0.233	0.103	0.76	356
SVI	0.068	0.218	0.166	0.95	364
SkM	0.053	0.228	0.175	0.79	219
SkM (ITF)	0.053	0.139	0.267	0.79	219

Coulomb interaction is neglected. m^*/m and K are the effective mass and the incompressibility modulus in infinite nuclear matter at saturation point.

by Fermi distributions with same rms radii and surface thicknesses, one reproduces the exact results for the parameter a with an accuracy of about 5 %. We have then checked that a change of 10 % in the surface thickness gives an equivalent change of 10 % in the value of a. We conclude from this analysis that the 25 % discrepancy observed by Buchler and Epstein [12]) (BE) between their calculated values and the experimental ones might be due to the kinetic energy functional these authors have used. The boundary condition chosen to calculate isolated nuclei at finite temperature might also play a minor role. The comparison with the results of Stocker and Burzlaff [6]) (SB) is more delicate. These authors have minimized, as an equilibrium condition at finite temperature, not the total free energy of the nucleus but the isothermal surface tension, calculated with a model which contains discontinuities of the densities at the surface. The surface contribution obtained by these authors compares quite well to ours, but we shall show in the next section that the dependence of a_s on the nuclear incompressibility modulus K found in their work is certainly due to the equilibrium condition used, which precisely neglects the finite value of K.

Sauer *et al.* [7]) have derived a mass formula for the level density parameter using thermal HF calculations. The leading terms (for SIII interaction) are

$$\frac{a}{A} = 0.055 + 0.150 A^{-\frac{1}{3}} \tag{39}$$

(asymmetry and Coulomb terms are found to be completely negligible). The corresponding curve, labelled SCM, is plotted in fig. 2.

With the same kind of parametrisation to our calculated values (including Coulomb interaction), we find, for the same force:

$$\frac{a}{A} = 0.054 + 0.287 A^{-\frac{1}{3}} + 0.9\ 10^{-3} A^{-\frac{2}{3}}. \tag{40}$$

Comparison with the values given in table 1 shows that both surface and curvature terms are modified; we think that one should not incorporate an explicit Z^2 dependence in eq. (40) since – as already noted in the third remark of subsect. 3.1 –

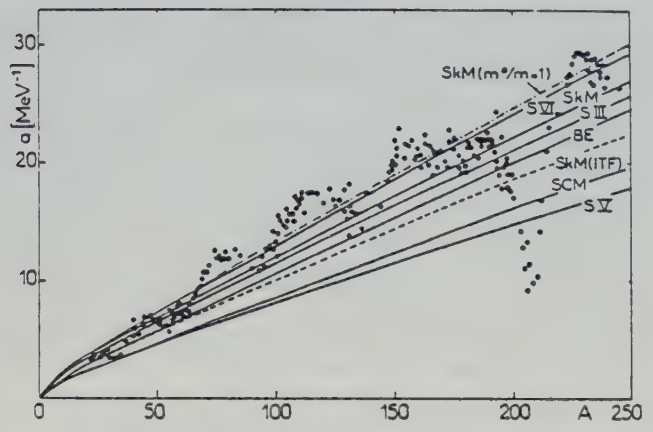


Fig. 2. Plot of the curve a as a function of A. Coulomb interaction has been incorporated in the calculations. The curve labelled BE is taken from ref. [12]). The results obtained in ref. [6]) for an incompressibility modulus of 170 MeV coincides exactly with the curve labelled SkM. The dashed-dotted curve corresponds to setting $m^*m = 1$ in the calculation with interaction SkM (see subsect. 3.2.2). Experimental values are taken from ref. [20]).

the potential does not appears explicitly in the expression of a. Its effect is seen only through the modification of the equilibrium densities. Our surface term is found to be twice as large as that of Sauer *et al.* One can see in fig. 2 that their curve, obtained in fitting the calculations in magic nuclei with $A < 100$ gives a good agreement with experimental data concerning these nuclei. But one can also see that the curve does not reproduce the general trend of the level density parameter as a function of A and underestimates the value of the surface term. We think that this is due to shell effects – present in HF calculations up to $T \sim 4$ MeV [see the first of ref. [7]) and ref. [18])] – so that the average curve of the level density parameter should lie above the values obtained from HF calculations in magic nuclei.

A minor source of disagreement – also related to shell effects – is that we have not incorporated any semi-classical approximation to the spin-orbit potential [10]) in our calculations. As for the Coulomb interaction, the spin-orbit force plays an indirect role only in the determination of a, slightly modifying the shape of the equilibrium densities. An estimate of this effect has been obtained in the following way. We have made HF calculations with a SIII force with and without spin-orbit interaction. The resulting densities have been used to calculate the values of a through eq. (37). It is seen that the surface term in eq. (40) is lowered by less than 10 %. This is in agreement with the fact, noted in the second of ref. [7]), that the spin-orbit force contributes ~ 6 % to the surface energy.

3.2.2. Effect of the parameters of the interaction. We show in table 1 and fig. 1 the results obtained with various Skyrme interactions [13]). In fig. 2 are plotted the curves a as a function of the mass number. Coulomb interaction has been included. We find that its effect is larger in heavy than in light nuclei, due to the fact that the

competition between Coulomb repulsion and surface energy favours proton distributions where the protons are pulled toward the outer part of the surface as the mass number increases.

It is clear from eq. (37) that the role of the effective mass is predominant. Table 1, fig. 1 and fig. 2 show that the larger the effective mass, the larger the value of a throughout the periodic table (the crossing of the SkM and the SIII curves for very large systems seen in fig. 1 comes from the fact that although SkM interaction has a greater effective mass, its saturation density in nuclear matter is also greater, $k_F = 1.34$ fm^{-1} versus 1.29 fm^{-1}). The other parameters characterising the interaction play an indirect role only through the determination of the equilibrium densities, which can be very similar for very different sets of parameters. For instance, interactions SkM and SIII give similar results for the parameter a although they have a very different incompressibility modulus K, 219 MeV and 356 keV, respectively; the curve obtained by SB with a choice of $K = 170$ MeV coincides exactly with our SkM curve (MTF approximation). One can see in table 1 that the surface coefficient a_s is not sensitive to the value of m^*/m or to the value of K, in contradiction with the result of SB. Asymetry effects have also been found negligible. Indeed, we could summarize our analysis as follows: the results obtained with effective interactions which give reasonable equilibrium densities differ only by the value of the effective mass, in accordance with the third qualitative remark of subsect. 3.1. In other words, we think that the level density parameter gives an independent constraint on the value of the effective mass. We shall now discuss this question in more detail.

The comparison between our results and experimental data can be seen in fig. 2. Although the parameter a shows a strong shell structure, its average dependence † on the mass number A is of the order of $a = \frac{1}{8}A$ MeV^{-1}. This estimate strongly favours a value $m^*/m \sim 1$, the best fit being obtained with interaction SVI which has $m^*/m = 0.95$. This result, which seems in contradiction with the value $m^*/m \sim 0.80$ given by quadrupole resonance analysis [14]), can be understood in the following way.

The presence of the effective mass in eq. (37) comes from the local density approximation (see subsect. 2.1) leading to eq. (10) for the single-particle energies $\varepsilon_q(k) = \hbar^2k^2/2m_q^* + V_q$. It is known that the HF approximation gives a density of states near the Fermi level which is too small compared to experimental results. It has been shown [4]) that one can correct this defect if one takes into account the coupling of individual particle levels to collective vibrations, leading to an effective mass which depends on the energy. This dependence raises the value of m^*/m from its value for the deepest states (effective mass due to the non-locality of the interaction ~ 0.8) to a value around unity (or even slightly greater than unity) near the

† This average behaviour, to which we refer, should not be interpreted as a compromise between open-shell nuclei and closed-shell nuclei, as our method is incapable of describing shell effects. In the comparison we just neglect nuclei near the magic ones.

Fermi level. The resulting modification of the spectrum is not expected to modify the equilibrium densities in a significant way, so that one can still use, in eq. (37), the densities found when one neglects the energy dependence of m^*/m. But of course the repercussion on the final value of a is a drastic and a satisfactory one: one can see in fig. 2 that the SkM curve (MTF approximation) shows around 15% discrepancy with experimental data, while the dashed-dotted curve, obtained by putting $m^*/m = 1$ in eq. (37) gives a very good agreement with the estimate $a = \frac{1}{8}A$ MeV^{-1} (values of m^*/m up to 1.1 would also be acceptable). Our conclusion is that one should use the usual effective mass in the potential part of the free energy, but not in the derivation of the functional relation between τ and ρ, where one should use the bare mass instead. Thus in eqs. (10), (11), (18) and (19) m^*/m should be replaced by 1.

Let us note as a final remark, that the agreement between calculated and experimental values seems to be better in heavy than in light nuclei: the calculated values overestimate the nuclear level densities in light nuclei. As already mentioned in subsect. 2.2, the statistical approach used here breaks down for systems with a small number of nucleons. We think that this question deserves a more detailed study which is beyond the scope of this work.

3.2.3. Astrophysical applications. Before going to the conclusion of the present work, we want to mention some consequences of the previous discussion on some astrophysical problems such as the study of the collapse of stars and the resulting supernovae [15-19]). First, let us notice that the size of the nuclei present at equilibrium in the hot dense matter (T up to 20 MeV) that constitutes the star determines its opacity to neutrinos and thus influences the rate at which energy can be expelled during the collapse. This size itself crucially depends on the balance between the nuclear surface energy and the Coulomb energy. We think that the thermal MTF method presented in this paper should give a good description of the nuclear surface at finite temperature. Comparison with thermal HF calculations is in progress.

Our second remark stresses the discussion of the last section. We think that a satisfactory description of the nuclear level densities is a necessary test for methods used to calculate an equation of state for matter at very high temperature, as the high number of levels in excited nuclei provides a way of storing energy. We have seen that it is necessary to take partially into account the energy dependence of the effective mass and that it can be done in a rather simple way.

4. Conclusion

In generalizing the modified Thomas-Fermi approximation to finite temperature, we have obtained a satisfactory way to describe self-consistently the density of excited states in nuclei. We have shown that, as a nucleus is not stable against heating, the response of the system strongly depends on the boundary conditions used in the

calculation at a given temperature. A simple analytic expression of the level density parameter, which depends on the equilibrium densities of the nucleons at $T = 0$, has been derived. The level density parameter appears as the mean value of the inverse effective kinetic energy of the local Fermi level. One thus confirms in a quantative way the particular role played by the nuclear surface and, among the parameters of the interaction, by the effective mass in determining the value of a.

Comparison with experimental results show that it is necessary to incorporate in this semi-classical model some information on the density of individual states near the Fermi level (which corresponds to taking into account the energy dependence of the effective mass) and that it can be done in a very simple way: use of the bare mass in the construction of the kinetic energy functional at finite temperature and of the usual effective mass in the potential part of the free energy. The effect of our prescription should be tested in astrophysical situations. Work in this direction is in progress.

We would like to thank J. R. Buchler for valuable discussions and O. Bohigas for a constant and stimulating interest in this work. One of us (M.B.) is grateful to the University of Florida and the National Science Foundation (AST 79–20024) for partial financial support and the Physics Department of the Florida University of Gainesville for its warm hospitality.

Appendix

We show that eq. (28) has no physically acceptable solution (i.e. vanishing for large r) if no additional constraint is added on the system.

Eq. (28), in the limit of large values of r where one can put $\Delta\rho \sim \rho''$, can be written in the form:

$$\rho''/\rho - \tfrac{1}{2}(\rho'/\rho)^2 - \tfrac{1}{2}kT \log \rho = \tfrac{1}{2}k(T\eta_0 - \lambda), \tag{A.1}$$

with $k = 2m/\hbar^2\beta$. If one defines:

$$\rho' = F(\rho), \tag{A.2}$$

then

$$\rho'' = F\frac{\mathrm{d}F}{\mathrm{d}\rho}. \tag{A.3}$$

Inserting eq. (A.2) and (A.3) into (A.1) leads to:

$$\frac{F}{\rho}\frac{\mathrm{d}F}{\mathrm{d}\rho} - \frac{1}{2}\frac{F^2}{\rho^2} - \tfrac{1}{2}kT \log \rho = \tfrac{1}{2}k(T\eta_0 - \lambda), \tag{A.4}$$

which can be integrated into:

$$F^2/\rho - \tfrac{1}{2}kT\rho(\log\rho - 1) = \tfrac{1}{2}k(T\eta_0 - \lambda)\rho + C_1, \tag{A.5}$$

where C_1 is a constant. If C_1 is not zero, then the asymptotic behaviour of eq. (5) is simply given by:

$$F^2 = C_1\rho \tag{A.6}$$

as one looks for solutions that vanishes for large r. Thus C_1 is positive and eq. (6) leads to:

$$\frac{\mathrm{d}\rho}{\mathrm{d}r} = \pm\sqrt{C_1\rho}, \tag{A.7}$$

or

$$\rho(r) = \tfrac{1}{4}(C_2 \pm C_1 r)^2. \tag{A.8}$$

This shows that there are solutions which vanish, as well as their first derivative, at a certain distance r_0. But of course these solutions are not valid in the whole r-space, as $\rho(r)$ becomes infinite as r increases, which is contradictory to the assumption made to obtain the solution given by eq. (A.8). These solutions are precisely those used by Buchler and Epstein to calculate an isolated nucleus at finite temperature. Beyond the point $r = r_0$, they take $\rho(r) = 0$, which corresponds to taking as an additional constraint an infinite repulsive potential in the region $r > r_0$.

The above discussion shows that if one looks for solutions of eq. (A.5) that are valid in the whole r-space, then necessarily one has $C_1 = 0$. Then:

$$F^2 = \tfrac{1}{2}k\rho^2[T(\log\rho - 1) + T\eta_0 - \lambda], \tag{A.9}$$

which implies:

$$\rho(r) \geqq \mathrm{e}^{1+\lambda/T-\eta_0}. \tag{A.10}$$

We conclude that there are no vanishing solutions of eq. (A.5). The solution (A.10) can nevertheless be used in a finite region of space if one adds an external pressure, such as is the case in astrophysical calculations of hot dense matter [15,16].

References

1) H. A. Bethe, Phys. Rev. **50** (1936) 332
2) A. Bohr and B. R. Mottelson, Nuclear structure, vol. I (Benjamin, NY, 1969) p. 156;
   J. R. Huizenga and L. G. Moretto, Ann. Rev. Nucl. Sci. **22** (1972) 427
3) H. Krivine and J. Treiner, Phys. Lett. **88B** (1979) 212
4) J. P. Jeukenne, A. Lejeune and C. Mahaux, Phys. Reports **25C** (1976) 83;
   G. E. Brown, J. H. Gunn and P. Gould, Nucl. Phys. **46** (1963) 598;
   V. Bernard and Nguyen Van Giai, Preprint IPNO/TH 79-55 Orsay
5) R. Denton, B. Mühlschlegel and O. J. Scalapino, Phys. Rev. 7 (1973) 3589

6) W. Stocker and J. Burzlaff, Nucl. Phys. **A202** (1973) 265
7) P. Quentin and H. Flocard, Ann. Rev. Nucl. Part. Sci. **28** (1978) 523;
G. Sauer, H. Chandra and U. Mosel, Nucl. Phys. **A264** (1976) 221
8) D. Pines and P. Nozières, The theory of quantum liquids (Benjamin, NY, 1966)
9) O. Bohigas, X. Campi, H. Krivine and J. Treiner, Phys. Lett. **64B** (1976) 381
10) Y. H. Chu, B. K. Jennings and M. Brack, Phys. Lett. **68B** (1977) 407
11) H. Krivine, J. Treiner and O. Bohigas, Nucl. Phys. **A336** (1980) 155
12) J. R. Buchler and R. I. Epstein, Ap. J. Lett. **235** (1980) 73
13) M. Beiner, H. Flocard, Nguyen Van Giai and P. Quentin, Nucl. Phys. **A238** (1975) 29
14) O. Bohigas, A. M. Lane and J. Martorell, Phys. Reports **51** (1979) 267
15) D. Q. Lamb, J. M. Lattimer, C. J. Pethick and D. G. Ravenhall, Phys. Rev. Lett. **41** (1978) 1623
16) J. R. Buchler and M. Barranco, Int. Colloquium on the physics of dense matter, Paris, Sept 1979;
M. Barranco and J. R. Buchler, in preparation
17) D. L. Tubbs and S. E. Koonin, Ap. J. **232** (1979) 59
18) P. Bonche and D. Vautherin, Int. Conf. on nuclear physics, Berkeley, August 1980
19) G. Baym, H. A. Bethe and C. J. Pethick, Nucl. Phys. **A175** (1971) 225;
F. D. Mackie and G. Baym, Nucl. Phys. **A285** (1977) 332
20) A. Gilbert and A. G. W. Cameron, Can. J. Phys. **43** (1965) 1446
21) J. R. Buchler and B. Datta, Phys. Rev. **C19** (1979) 494

I.D.2:
I.E.1

Nuclear Physics A336 (1980) 155–184: © *North-Holland Publishing Co., Amsterdam*
Not to be reproduced by photoprint or microfilm without written permission from the publisher

DERIVATION OF A FLUID-DYNAMICAL LAGRANGIAN AND ELECTRIC GIANT RESONANCES

H. KRIVINE, J. TREINER and O. BOHIGAS

Division de Physique Théorique †, Institut de Physique Nucléaire, 91406 Orsay Cedex, France

Received 16 July 1979

Abstract: Starting from the TDHF equations and a schematic interaction of the Skyrme type we have derived an approach to nuclear vibrations in which only macroscopic densities and velocity fields appear. The specific role of the momentum-dependent terms which closely imitate the usual charge exchange forces is discussed. It is shown how a hamiltonian density that includes these exchange effects can be constructed. The method presented is applied to the description of nuclear electric monopole and dipole vibrations. The role of surface effects in determining the eigenfrequencies is emphasized. It is shown how an effective dipole mass introduced previously phenomenologically in the framework of the dynamical liquid droplet model comes out naturally from our approach. The expressions giving the collective energies are simple enough to relate the final results to the various parameters characterizing the effective interaction. The constraints that the present experimental information put on the effective interaction are discussed. Finally comparison is made of our results in the limit of a large system with the ones obtained in the framework of the Landau theory.

1. Introduction

A large effort on the study of the giant resonances has been performed in recent years. At present, we know not only the systematic properties of the giant dipole state [1]), but also to a lesser extent those of the isocalar quadrupole resonances [2]). A systematic behaviour of the isoscalar monopole state, although at a much more primitive stage, seems also to emerge [3]). From the theoretical point of view, a large variety of approaches have been used in order to describe giant resonances going from pure classical hydrodynamical treatments to quantal approaches like the RPA or the generator coordinate method. One main difference between present day treatments and the older ones consists on the emphasis that is now put on the simultaneous description of bulk properties and excitations of nuclei. Efforts in this direction are formulations of the TDHF equations which are well adapted to the study of collective motions. For instance, the RPA approximation which represents a limiting case of TDHF, has proved to be a powerful tool to the study of giant resonances [4]). But even with the use of schematic forces which drastically simplify the calculations, they still remain quite involved and in some respects over-detailed. One way to simplify RPA calculations is constituted by the sum rule approach [5, 22, 25]). Another way to simplify TDHF equations consists in deriving

† Laboratoire associé au CNRS.

from them fluid-dynamical equations [6, 7]). It is this latter approach which is adopted in this paper. Our procedure is very close in spirit to the ones presented in refs. [7-11]).

The material of the present work is organized as follows. In a first part (sect. 2) we obtain, using a Skyrme interaction and starting from the TDHF equations, the Euler equations of motion and the continuity equations in which only macroscopic densities (ρ_n, ρ_p) and velocity fields ($\boldsymbol{u}_n$, $\boldsymbol{u}_p$) appear. Use of an approximation, which improves the one given by semiclassical expansions, is adopted for the internal kinetic energy density τ. The momentum-dependent terms of the interaction simulate well isospin exchange forces giving rise to a source term in the equations of continuity that has been neglected in previous calculations. We then construct an adequate lagrangian (or hamiltonian) density: using a classical variational principle with this lagrangian density and the equations of continuity as constraints, we reobtain the Euler equations. It is seen that there are genuine quantum effects that correct the classical collective kinetic energy.

In sect. 3 we use the collective hamiltonian derived in sect. 2 to study monopole an dipole vibrations and comparison is made with RPA results. We show that the correction terms to the classical collective kinetic energy give rise to enhancement factors for the isosvector modes. By simplifying the formulae giving the eigenfrequencies contact can be made with purely classical hydrodynamics. The resulting expressions are simple enough to understand the role of the different parameters of the initial microscopic effective interaction in determining the final results. This can be exploited to construct (sect. 4) an effective interaction in agreement with the experimental data discussed. We illustrate this point by giving an explicit example. We finally compare our results with the ones obtained using Landau theory of infinite Fermi systems.

2. Formalism

2.1. DERIVATION OF THE EQUATIONS OF MOTION

As is well known, the equations of motion for the density matrices

$$\rho_q(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}', t) = \sum_{z_q} \psi^*_{z_q}(\boldsymbol{r}, t)\psi_{z_q}(\boldsymbol{r}', t), \qquad q = \text{n, p}, \tag{2.1}$$

where $\psi_{z_q}(\boldsymbol{r}, t)$ denote the single-particle wave functions of the Slater determinant describing the nucleus in the TDHF approximation, can be written

$$i\hbar \frac{\partial \rho_q}{\partial t} = [W_q, \rho_q], \qquad q = \text{n, p}. \tag{2.2}$$

In eq. (2.2), where n, p stands for neutron and protons respectively, $W_q(\boldsymbol{r})$ is the

average field operator which, for the Skyrme interaction, takes the form

$$W_q(r) = -\nabla \cdot \frac{\hbar^2}{2m_q^*(r)} \nabla + U_q(r) + \frac{1}{2i}[I_q \cdot \nabla + \nabla \cdot I_q]; \tag{2.3}$$

the quantities $U_q(r)$, I_q and the effective mass $m_q^*(r)$ are given in terms of the nucleon and kinetic energy densities and of the different parameters characterizing the interaction. Their precise form is given in eqs. (4.9), (4.10) and (4.11) of ref. [12]). Let us simply recall that the momentum-dependent terms in the interaction (governed by the parameters called t_1 and t_2) induce a non-locality of the average field, i.e. an effective mass, which can be written (in the case $\rho_n = \rho_p = \frac{1}{2}\rho$)

$$\frac{m}{m^*} = 1 + \frac{1}{4}\frac{m}{2\hbar^2}(3t_1 + 5t_2)\rho. \tag{2.4}$$

In order to derive the equations of continuity and the eqations of motion, let us decompose the wave function into its real and imaginary part

$$\psi_{z_q}(r, t) = \varphi_{z_q}(r, t)\exp[imS_{z_q}(r, t)/\hbar]. \tag{2.5}$$

As usual, by taking the diagonal part of eq. (2.2), one obtains the equation of continuity

$$\frac{\partial \rho_q}{\partial t} + \operatorname{div} \rho_q u_q = K \operatorname{div} \rho\rho_q(u - u_q). \tag{2.6}$$

In (2.6) $\rho_q(r, t)$ is the diagonal part of the density matrix

$$\rho_q(r, t) = \sum_{z_q} \varphi_{z_q}^2 = \rho_q(r, r, t) \tag{2.7}$$

and u_q is the velocity

$$u_q = \sum_{z_q} \varphi_{zq}^2 \nabla S_{z_q} \Big/ \sum_{z_q} \varphi_{z_q}^2; \tag{2.8}$$

the total density ρ and the velocity u are defined by

$$\rho = \rho_n + \rho_p, \tag{2.9a}$$

$$\rho u = \rho_n u_n + \rho_p u_p, \tag{2.9b}$$

and the quantity K is given by

$$K = \frac{m}{2\hbar^2}(t_1 + t_2). \tag{2.10}$$

Notice that the linear combination of t_1 and t_2 giving the effective mass and the second member of the equation of continuity are not the same. As already noted [12-14]) the r.h.s. of eq. (2.6), which is due to the velocity-dependent terms of the interaction, represents a neutron-proton exchange of the interaction in the dynamical case. This term expresses the fact that the proton and neutron density change is not only due

to the physical motion of the particles as for a classical fluid, but is also due to the local exchange of protons and neutrons. Obviously the total density, as can be seen from (2.6), is locally conserved and does satisfy the usual continuity equation

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div} \rho \boldsymbol{u} = 0. \tag{2.11}$$

The situation in the present case can be closely compared to the description of superfluid helium He II [refs. [15,16])]. In this latter case too the system may be considered as a mixture of two fluids – one called normal, the other called superfluid; whereas each fluid density is not locally conserved, their sum is conserved. As will be seen in subsect. 2.2 the presence of a source term in (2.6) will modify the usual expression of the collective kinetic energy.

The equations of motion can be derived as usual by applying the operator $\nabla_r - \nabla_{r'}$ to both sides of eq. (2.2) and by taking the limit $r' \to r$. Use of the two following approximations is made.

(i) Adiabatic approximation: we assume that the velocities are small. This implies (see eq. (2.8)) that we neglect all terms quadratic in ∇S_τ. As the system is slowly varying, we assume that the time-dependent wave functions are at each time approximate solutions of a set of static HF equations.

(ii) We assume that the hamiltonian density of the static nucleus H is a functional of the densities ρ_q and its derivatives only and that the internal energy in the dynamical case is given by the *same* functional of the time-dependent densities.

At the end of this section the validity and limitations of these assumptions will be discussed. As shown in appendix A, one finally obtains the two coupled equations

$$m \frac{\partial \rho_q \boldsymbol{u}_q}{\partial t} = -\rho_q \nabla \left(\frac{\delta H}{\delta \rho_q} \right). \tag{2.12}$$

In this and the following equations $\delta H/\delta \rho$ must be understood as the functional variation of H with respect to ρ, namely

$$\frac{\delta H}{\delta \rho} = \frac{\partial H}{\partial \rho} - \nabla \cdot \frac{\partial H}{\partial \nabla \rho}. \tag{2.13}$$

Eq. (2.12) can be rewritten as the irrotational motion of a fluid,

$$m \frac{\partial \boldsymbol{u}_q}{\partial t} = -\nabla \left(\frac{\delta H}{\delta \rho_q} \right), \tag{2.14}$$

if one remembers that the term neglected in going from (2.12) to (2.14), namely $m\boldsymbol{u}_q \partial \rho_q / \partial t$, is of second order in u_q, as can be seen using the continuity equation (2.6). That the motion is irrotational is not surprising if one keeps in mind that in the case of a classical fluid, if its motion is isoentropic and if quadratic terms in the velocities are neglected, then the Euler equations can be written exactly in the form (2.14), with $\delta H/\delta \rho_q$ replaced by the enthalpy.

It is clear that eq. (2.12) gives the correct Euler equations in the static case

$$\frac{\delta H}{\delta \rho_q} = \lambda_q, \tag{2.15}$$

where λ_q represents the energy of the last bound particle.

2.2. SEARCH FOR A FLUID-DYNAMICAL LAGRANGIAN DENSITY

Eqs. (2.12) are two Euler equations for a mixture of two fluids with internal energy H. Classically, they can be obtained through a variational principle from the Lagrangian density,

$$\mathscr{L}_{\mathrm{cl}} = \tfrac{1}{2}m\rho_{\mathrm{n}}\boldsymbol{u}_{\mathrm{n}}^2 + \tfrac{1}{2}m\rho_{\mathrm{p}}\boldsymbol{u}_{\mathrm{p}}^2 - H, \tag{2.16}$$

and using the classical equations of continuity as constraints

$$\frac{\hat{c}\rho_q}{\hat{c}t} + \mathrm{div}\ \rho_q \boldsymbol{u}_q = 0. \tag{2.17}$$

But in the present case, eqs. (2.16) and (2.17) do not hold because of the local exchange of protons and neutrons. We instead have to use eq. (2.6) and therefore modify the Lagrangian density (2.16) in order to reobtain the Euler equations (2.12). We show in appendix B that starting from the Lagrangian density,

$$\mathscr{L} = \mathscr{L}_{\mathrm{cl}} + \tfrac{1}{2}mK\rho_{\mathrm{n}}\rho_{\mathrm{p}}(\boldsymbol{u}_{\mathrm{n}} - \boldsymbol{u}_{\mathrm{p}})^2, \tag{2.18}$$

and minimizing the action integral,

$$I = \int \mathrm{d}t \int \mathrm{d}\boldsymbol{r}\,\mathscr{L}(\rho_q, \boldsymbol{u}_q), \tag{2.19}$$

with respect to ρ_q and $\boldsymbol{u}_q$, using the proper continuity eq. (2.6) as constraints, one obtains the two coupled equations

$$\begin{aligned} m\frac{\hat{c}\boldsymbol{u}_{\mathrm{n}}}{\hat{c}t} + \nabla\left[\frac{\delta H}{\delta \rho_{\mathrm{n}}} + \tfrac{1}{2}m\boldsymbol{u}_{\mathrm{n}}^2 + \tfrac{1}{2}mK\rho_{\mathrm{p}}(\boldsymbol{u}_{\mathrm{n}} - \boldsymbol{u}_{\mathrm{p}})^2\right] &= 0, \\ m\frac{\hat{c}\boldsymbol{u}_{\mathrm{p}}}{\hat{c}t} + \nabla\left[\frac{\delta H}{\delta \rho_{\mathrm{p}}} + \tfrac{1}{2}m\boldsymbol{u}_{\mathrm{p}}^2 + \tfrac{1}{2}mK\rho_{\mathrm{n}}(\boldsymbol{u}_{\mathrm{n}} - \boldsymbol{u}_{\mathrm{p}})^2\right] &= 0. \end{aligned} \tag{2.20}$$

They reduce to eq. (2.14) if one neglects all quadratic terms in the velocities. So we see that the effect of the r.h.s. of the equations of continuity is to add a term to the classical collective kinetic energy. This additional term will play an imporant role for isovector modes where the neutrons move against the protons and consequently $(\boldsymbol{u}_{\mathrm{n}} - \boldsymbol{u}_{\mathrm{p}})^2$ will be large, whereas for isoscalar modes where neutrons and protons are moving in phase, it will be small.

2.3. LIMITATIONS OF THE PRESENT APPROACH

The adiabatic approximation is taken for granted and to verify its validity is beyond the scope of this work. Let us however recall that the RPA, which can be obtained as a limiting case of the ATDHF theory, has been successfully and widely used to describe collective nuclear motion.

Concerning the second approximation made, some remarks are in order here.

That the static Hamiltonian H is a functional of ρ and its derivatives has been the starting point of many descriptions of nuclear properties. The problem should be divided in two parts: (i) derivation of a kinetic energy density τ and (ii) derivation of an interaction energy density V. There exist systematic approaches to obtain the kinetic energy density as a function of ρ and its derivatives. In this paper we use for τ the same prescription used in ref. [18]), which is a modification of the semi-classical method used in ref. [19]):

$$\tau_q = \frac{\hbar^2}{2m}\left[\alpha\rho_q{}^{5/3} + \beta\frac{(\nabla\rho_q)^2}{\rho_q}\right]. \tag{2.21}$$

As will be seen shortly expression (2.21) is not adequate for a deformed system. So, we shall limit ourselves in this paper to spherical nuclei. For the interaction, we have used several versions of Skyrme forces [20]) which, as is well known give rise for magic nuclei to an interaction energy density involving ρ and its derivatives. More generally, one could take a finite range interaction by using a density matrix expansion [21]). For a non-spherical symmetrical system additional current densities should be included.

That the dynamical internal energy can be simply obtained by replacing in τ and V the static ρ^0 by the time-dependent one ρ is generally incorrect. This can be most simply illustrated for the kinetic energy density τ by the following scaling argument [22]).

Let us apply to the wave functions the quadrupole transformation

$$\psi_\alpha(x, y, z) \to \psi_\alpha\left(\frac{x}{\lambda}, \frac{y}{\lambda}, \lambda^2 z\right), \tag{2.22}$$

then the exact total kinetic energy T for a spherical symmetric system transforms as

$$T(\lambda) = \sum_\alpha |\nabla\psi_\alpha|^2 \mathrm{d}r \to \frac{1}{3}\left(\frac{2}{\lambda^2} + \lambda^4\right)T(1), \tag{2.23}$$

while the leading $\rho^{5/3}$ term in expansion (2.21) remains unchanged as (2.22) is a volume conserving transformation. Thus the approximate kinetic energy behaves in an essentially different manner compared to the exact one and it is ruled out to describe, for instance, quadrupole vibrations by just inserting $\rho(t)$ in (2.21). On the contrary, it is straightforward to show by a similar scaling argument that for monopole and dipole transformations expansion (2.21) has the correct behaviour. How to deal with this in the general case has been extensively studied recently by

Holzwarth *et al.* [23]). These authors show that for the monopole and surface dipole mode τ can still be considered as a function of the scalar field ρ and of its derivatives but that generally the time-dependent kinetic energy density will also depend on vector fields related to the motion considered. In the present paper only monopole and surface dipole modes will be considered and thus assumption (ii) of subsect. 2.1 is justified.

Concerning the interaction energy density V, we use the same prescription: we replace the static density by the time-dependent one in the function V used for the static case. This way of proceeding may be certainly questioned, but the fact that we obtain, as will be seen in sect. 3, results that may be closely compared to more quantal treatments, as RPA, indicates that it is reasonable, at least for the cases considered.

3. Application to monopole and dipole resonances

We place ourselves now in the same context as in RPA calculations, that is we look for small harmonic oscillations around equilibrium of spherical nuclei.

Thus, we write

$$\rho_q(r, t) = \rho_q^0(r) + \rho_q^1(r) \sin \omega t, \tag{3.1}$$

where the transition density $\rho_q^1(r)$ is small compared to the equilibrium density $\rho_q^0(r)$ and satisfies

$$\int \rho_q^1(r) \mathrm{d}r = 0. \tag{3.2}$$

The equations of continuity (2.6), after linearization, allow us to factorize

$$u_q(r, t) = v_q(r) \omega \cos \omega t, \tag{3.3}$$

where v has dimensions of a length. The correct general procedure would be to solve, after linearizing, the coupled equations (2.14) and (2.6) in order to determine the functions v_q and ρ_q. However, this is difficult and leads in principle [24]) to two coupled fourth-order differential equations. Instead of doing so, we come back to the lagrangian density (2.18): the frequencies of the resonances are determined by writing that the total energy is constant in time; for each mode, we then assume some specific form of the velocity field. Expanding up to second order in ρ_q^1 the total energy one obtains

$$\begin{aligned} E = \int \mathscr{H} \mathrm{d}r = {} & \tfrac{1}{2} m\omega^2 \cos^2 \omega t \int [\rho_n^0 v_n^2 + \rho_p^0 v_p^2 + K \rho_n^0 \rho_p^0 (v_n - v_p)^2] \mathrm{d}r \\ & + \int H(\rho_n^0, \rho_p^0) \mathrm{d}r + \sin \omega t \int \left[\frac{\delta H}{\delta \rho_n} \rho_n^1 + \frac{\delta H}{\delta \rho_p} \rho_p^1 \right] \mathrm{d}r \\ & + \tfrac{1}{2} \sin^2 \omega t \int \left[\frac{\delta^2 H}{\delta \rho_n^2} (\rho_n^1)^2 + 2 \frac{\delta^2 H}{\delta \rho_n \delta \rho_p} \rho_n^1 \rho_p^1 + \frac{\delta^2 H}{\delta \rho_p^2} (\rho_p^1)^2 \right] \mathrm{d}r. \end{aligned} \tag{3.4}$$

As expected, the linear term in $\sin \omega t$ vanishes: as the equilibrium density ρ_q^0 is solution of the static eq. (2.15), we can replace in (3.4) the functional variation $\delta H/\delta \rho_q$ by the constant λ_q, and according to eq. (3.2), the first order term is zero.

Writing that the energy E is time independent gives the frequencies of the resonances as a ratio of two quantities

$$\omega^2 = C/mD. \tag{3.5}$$

The numerator C (third term in the r.h.s. of (3.4)) involves the second variation of the potential part with respect to the densities, i.e. constitutes the restoring force, and the denominator D (first term in the r.h.s. of (3.4)) depends on the collective kinetic energy and gives the mass parameter.

Monopole vibrations. We make the usual assumption for the velocity field

$$v(r) = r, \tag{3.6}$$

but instead of setting $v_n = v_p$ for isoscalar and $v_n = -v_p$ for isovector as is often done, we make the slightly more general parametrization

$$\begin{aligned} \rho_n v_n &= \tfrac{1}{2} r(1-\beta)\rho^0, \\ \rho_p v_p &= \tfrac{1}{2} r(1+\beta)\rho^0. \end{aligned} \tag{3.7}$$

In this way, the isosclar and isovector modes are left free to be coupled and their eventual decoupling will be an outcome of the variational calculation. The resulting transition densities are determined through the linearized equations of continuity

$$\begin{aligned} \rho_n^1 &= -\tfrac{1}{2}\sin \omega t \left(3 + r\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}\right)\rho^0[1-\beta-K(\rho_-^0+\beta\rho^0)], \\ \rho_p^1 &= -\tfrac{1}{2}\sin \omega t \left(3 + r\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}\right)\rho^0[1+\beta+K(\rho_-^0+\beta\rho^0)]. \end{aligned} \tag{3.8}$$

where

$$\rho_-^0 = \rho_n^0 - \rho_p^0.$$

The action integral I (2.19) is now a function of β. Using

$$\frac{\partial I(\beta)}{\partial \beta} = 0 \tag{3.9}$$

and (3.5), one has two equations for ω and β that can then be solved. One can see in table 1 that one always obtains one value of $\beta \approx 0$ and the other with modulus $\gg 1$, corresponding respectively (see eq. (3.7)) to an isocalar (labelled 0s) and an isovector vibration (labelled 0v). Indeed, it is straightforward to check that if $\rho_n^0 = \rho_p^0$ and if we neglect the Coulomb field, then the solutions are simply $\beta = 0$ and $\beta = \infty$ (which as will be seen later, does not lead to infinite currents or to large transition

TABLE 1

Parameters defining the amplitude of the transition densities for monopole and dipole vibrations (values obtained with the interaction SIII)

	β_s	ε_{0s}	β_v	$\varepsilon_{0v}\beta_v$	ε_{1v}
^{16}O	−0.047	0.150	14.9	0.120	0.150
^{40}Ca	−0.011	0.081	34.8	0.059	0.076
^{90}Zr	−0.075	0.047	−16.5	0.033	0.044
^{208}Pb	−0.160	0.026	−8.0	0.018	0.023

densities). Eqs. (3.4), (3.7) and (3.8) give the explicit expressions of the stiffness C and the mass parameter D of (3.5).

Dipole vibration. As mentioned in sect. 2, we shall limit ourselves to the Goldhaber-Teller (GT) mode (but with a surface thickness in the equilibrium densities ρ_n^0 and ρ_p^0). Thus the velocity field is chosen as

$$\begin{aligned} \tfrac{1}{2}\rho^0 v_n &= \rho_p^0 z r_0, \\ \tfrac{1}{2}\rho^0 v_p &= -\rho_n^0 z r_0, \end{aligned} \tag{3.10}$$

where z is a unit-vector along the z-axis and r_0 the r.m.s. radius. From the linearized equations of continuity one obtains:

$$\begin{aligned} \rho_n^1 &= -2 \operatorname{div} \frac{\rho_n^0 \rho_p^0}{\rho^0} (1 + K\rho^0) r_0 z, \\ \rho_p^1 &= -\rho_n^1. \end{aligned} \tag{3.11}$$

Eqs. (3.4), (3.10) and (3.11) give the energy of the dipole vibration (labelled 1v).

Finally one has to check, for the consistency of the method, that the assumed condition $\rho_q^1(r)/\rho_q^0(r) \ll 1$ is satisfied. Indeed the transition densities ρ_q^1 and the velocities are determined up to a multiplicative factor ε. The square of ε is obtained by quantizing the energy, i.e. by setting

$$E - E_0 = \hbar\omega, \tag{3.12}$$

where E_0 is the energy of the static ground state. As can be seen from table 1 the values of ε_{0s}, $\varepsilon_{0v}\beta_v$, ε_{1v} are much less than one which assures that the required condition is satisfied.

We show in appendix C how to estimate these quantities, which are smaller the bigger the nucleus is. It is also shown that the transition densities for the monopole isoscalar and isovector modes are similar.

3.1. COMPARISON WITH RPA RESULTS

In order to test the accuracy of the method proposed here we now compare our

TABLE 2

Energies in MeV of the different modes obtained with interaction SIII

	Monopole ($L = 0$)							Dipole ($L = 1$ $T = 1$)			
	Isoscalar ($T = 0$)				Isovector ($T = 1$)						
	PW	E_{31} [a])	E_{1-1} [a])	E_{31} [b])	PW	E_{31} [b])	E^{+}_{1-1} [b])	PW	E_{1-1} [c])	E_{31} [b])	E^{+}_{1-1} [b])
^{16}O	32.8	34.5	28.2	35	43.9	45	39	25.4	24.9	28	25
^{40}Ca	27.5	28.5	25.6	30	39.8	42	38	21.5		24	22
^{90}Zr	22.2	23.4	22.1	25	35.3	39	36	18.3	19.2	21	19
^{208}Pb	17.8	17.9	16.9	20	30.5	35	34	15.3	14.8	18	17

Columns labelled PW correspond to results obtained in the present work.

[a]) Results obtained in ref. [5]).

[b]) Results obtained in ref. [36]).

[c]) Results obtained in ref. [26]). See text (subsect. 3.1) for further explanation.

results with those obtained in selfconsistent RPA descriptions (all obtained with the same effective interaction SIII). Results for the energies are given in table 2. Also included are results obtained with RPA sum rules. The quantities E_{31} and E_{1-1} correspond respectively to the mean energies $(m_3/m_1)^{\frac{1}{2}}$ and $(m_1/m_{-1})^{\frac{1}{2}}$, where m_k is the kth energy weighted moment of the strength [5]); E^{+}_{1-1} corresponds to an upper bound to E_{1-1}. Results included in columns labelled (a) and (c) correspond to fully selfconsistent calculations, (this is not the case for the results included in columns labelled (b)). When possible, our results do compare well with the selfconsistent calculations. There remain some discrepancies with the results of ref. [36]), discrepancies that we attribute to the lack of selfconsistency in the numerical calculations of the latter.

We thus consider that our fluid-dynamical method is reliable and may be an adequate tool to investigate in a simple way some dynamical properties of the interactions used. In particular, the results with SIII show systematic differences with experimental data (see discussion in sect. 4). We shall now analyze more precisely the structure of the mass parameters mD and the restoring forces C for each mode to better understand what determines the frequencies.

3.2. MASS PARAMETERS

Although we have performed the calculations listed in table 2 in the general case, in order to simplify the discussion we shall assume that $\rho^0_n = \rho^0_p$ in the monopole case, that $\rho^0_n = (N/A)\rho^0$ and $\rho^0_p = (Z/A)\rho^0$ in the dipole case and neglect the Coulomb field. It is easy to see that in the monopole case, the velocity field given in eq. (3.7) leads to a mass parameter of the form:

$$D = \tfrac{1}{2}Ar_0^2[1+\beta(1+\kappa_{0v})], \tag{3.13}$$

with κ_{0v} defined by:

$$\kappa_{0v} = K \frac{\int \rho^{02} r^2 \mathrm{d}\boldsymbol{r}}{A r_0^2} . \tag{3.14}$$

In the dipole case, the velocity field given in eq. (3.10) leads to the following expression:

$$D = \left\{ \frac{4NZ}{A^2} r_0^2 \int \rho^0 (1 + K\rho^0) \mathrm{d}\boldsymbol{r}. \right. \tag{3.15}$$

So we have three mass parameters:

$$D_{0s} = \left\{ A r_0^2, \right. \qquad L = 0, \quad T = 0, \tag{3.16a}$$

$$D_{0v} = \left\{ A r_0^2 (1 + \kappa_{0v}), \right. \qquad L = 0, \quad T = 1, \tag{3.16b}$$

$$D_{1v} = \left\{ \frac{4NZ}{A^2} A r_0^2 (1 + \kappa_{1v}), \right. \qquad L = 1, \quad T = 1, \tag{3.16c}$$

where κ_{1v} is defined by

$$\kappa_{1v} = K \frac{\int \rho^{02} \mathrm{d}\boldsymbol{r}}{A} , \tag{3.17}$$

r_0 is the r.m.s. radius and K is given by (2.10).

Expressions (3.16) are proportional to the linear energy-weighted sum rule (m_1) results [27]). It is worthwhile to note that the presence of the correct enhancement factors (3.14) and (3.17) in the isovector modes can be traced back to the adequate treatment of the velocity-dependent terms in the interaction, that give rise to the source terms in the equation of continuity (2.6). As previously seen, they modify the classical collective kinetic energy and consequently the mass of the collective motions. In the limit of a large system, the two enhancement factors have the same value $\kappa_{0v} = \kappa_{1v} = \kappa^{NM} = K\rho^0$. In table 3 we give results of the enhancement factors for a variety of nuclei computed with the interaction SIII. The nuclear matter value is only approached but not attained for very heavy nuclei. The values

TABLE 3

Enhancement factors for monopoles (0v) and dipole (1v) isovector modes obtained with interaction SIII [ref. [20])]

	^{16}O	^{40}Ca	^{90}Zr	^{208}Pb	N.M.
κ_{0v}	0.21	0.27	0.31	0.39	0.52
κ_{1v}	0.31	0.36	0.39	0.42	0.52

corresponding to medium nuclei are significantly lower, as for such nuclei the relative importance of surface effects are larger.

3.3. RESTORING FORCE PARAMETERS C

It is straightforward to obtain from eq. (3.4) the expressions for the stiffness parameters C. We do not give them explicitly as they are lengthy and too involved to be instructive. Nevertheless with the former assumption $\rho_n^0 = \rho_p^0$ they can be easily related to some quantities defined in nuclear matter. Indeed, eq. (3.5) can be rewritten for each mode in the following form:

$$\hbar\omega_{0s} = \left[\frac{\hbar^2}{m}\frac{\int \rho^0(r)\chi(r)\mathrm{d}r}{D_{0s}}\right]^{\frac{1}{2}}, \qquad (L=0, T=0), \tag{3.18}$$

$$\hbar\omega_{0v} = \left[\frac{\hbar^2}{m}\frac{18\int \rho^0(r)E_s(r)[1+2K\rho^0(r)]^2\mathrm{d}r}{D_{0v}}\right]^{\frac{1}{2}}, \qquad (L=0, T=1), \tag{3.19}$$

$$\hbar\omega_{1v} = \left[\frac{\hbar^2}{m}\tfrac{2}{3}r_0^2\frac{\int\left[\frac{\rho^{0\prime}(r)}{\rho^0(r)}(1+2K\rho^0(r))\right]^2\rho^0(r)E_s(r)\mathrm{d}r}{D_{1v}}\right]^{\frac{1}{2}}, \qquad (L=1, T=1) \tag{3.20}$$

where the function $\chi(r)$ is defined by:

$$\chi(r) = 9\rho(r)\frac{\delta^2 H}{\delta\rho^2}\bigg|_{\rho(r)=\rho^0(r)}. \tag{3.21}$$

The function $E_s(r)$, which appears in both monopole isovector and dipole modes, is defined by:

$$E_s(r) = \tfrac{1}{2}\rho(r)\frac{\delta^2 H}{\delta\rho_-^2}\bigg|_{\rho(r)=\rho^0(r)}. \tag{3.22}$$

The functions $\chi(r)$ and $E_s(r)$ coïncide in the limit of an infinitely large system respectively with the incompressibility modulus χ^{NM} and the symmetry energy E_s^{NM} of nuclear matter and can thus be interpreted as incompressibility and symmetry energy densities [cf. ref. [28])]. Indeed, in the limit of a large system, it is easy to solve directly the differential equations of motion (2.6) and (2.12). If we impose $\rho_n^1 = \rho_p^1$ or $\rho_n^1 = -\rho_p^1$ (respectively for isoscalar and isovector modes), one obtains two wave equations

$$\Delta\rho_q^1 - \frac{1}{c_i^2}\ddot{\rho}_q^1 = 0 \qquad (i = \mathrm{s}, \mathrm{v}), \tag{3.23}$$

where the velocity of propagation of the density variation is given by

$$c_s^2 = \frac{\chi^{NM}}{9m}, \tag{3.24a}$$

$$c_v^2 = 2\frac{E_s^{NM}(1+\kappa^{NM})}{m}. \tag{3.24b}$$

By taking typical values for the quantities appearing in eqs. (3.24) (for instance $\chi^{NM} \approx 230$ MeV, $E_s^{NM} \approx 32$ MeV and $\kappa^{NM} \approx 0.4$) one obtains $c_s = 0.17$ and $c_v = 0.31$ in units of the velocity of light. Formulae similar to (3.23) and (3.24) have been previously given by many authors [see, e.g. ref. [28])]. Notice however the appearance in (3.24b) of the enhancement factor κ^{NM}, when exchange forces are not neglected.

Monopole isoscalar mode. Formula (3.18) provides a definition of the incompressibility of the nucleus χ_A:

$$\hbar\omega_{0s} = \left[\frac{\hbar^2}{m}\frac{\chi_A}{r_0^2}\right]^{\frac{1}{2}}, \tag{3.25}$$

where

$$\chi_A = \frac{1}{A}\int \rho^0(r)\chi(r)\mathrm{d}\boldsymbol{r}. \tag{3.26}$$

On the other hand, if one makes a constant density (CD) approximation in (3.18), one is left with an expression which has the same structure as that of the liquid drop model [31])

$$\hbar\omega_{0s} = \left[\frac{\hbar^2}{m}\frac{\chi^{NM}}{r_0^2}\right]^{\frac{1}{2}}. \tag{3.27a}$$

Notice, however, that in the case of the monopole compression mode of a liquid drop, the numerical factors are not the same as in (3.27a) but

$$\hbar\Omega_{LD} = \left[\frac{\pi^2}{15}\frac{\hbar^2}{m}\frac{\chi^{NM}}{r_0^2}\right]^{\frac{1}{2}} \tag{3.27b}$$

(see eqs. (3.30), (3.31) of this paper for further discussion).

In fig. 1 is plotted the incompressibility density $\chi(r)$. It shows an important structure near the surface. Notice that the negative part is not only due to surface effects. If one considers the saturation curve of nuclear matter as a function of ρ, when going from high to low densities, the curvature is successively positive ($\rho \gtrsim 0.035$) and afterwards negative. Correspondingly, the dashed curve in fig. 1 is positive when $r \lesssim 6.5$ fm, and becomes negative beyond this point. Thus one understands the important discrepancy between results obtained via formula (3.27a) and (3.25): the function $\chi(r)$ which is close to its nuclear matter value in the center

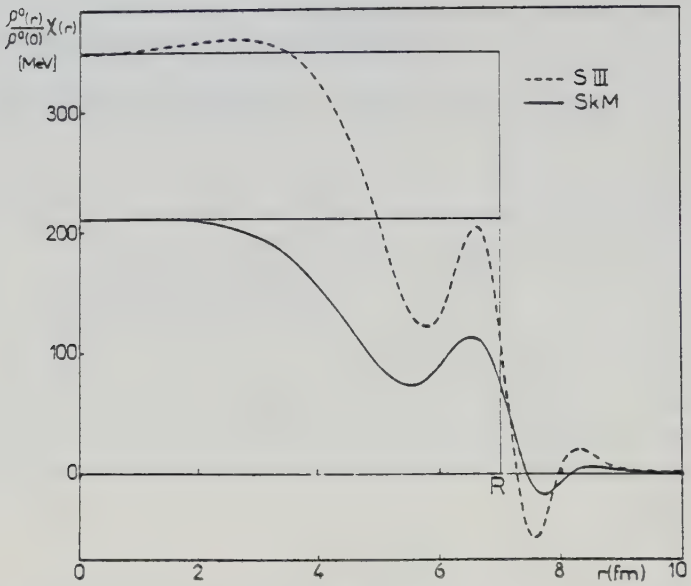


Fig. 1. Plot of the incompressibility density $\chi(r)$ in ^{208}Pb [eqs. (3.21), (3.25) and (3.26)] for two different interactions: SIII and SkM (see subsect. 4.1). Thin lines correspond to the constant density (CD) approximation; $R = (\frac{3}{5})^{1/2} r_0$ is the mass radius.

of the nucleus starts decreasing at about 5 fm in ^{208}Pb whereas in the CD approximation it is taken constant up to $R = \sqrt{\frac{3}{5}} r_0 \sim 7$ fm. Consequently the CD approximation badly overestimates the integral [see also refs. [29, 5])].

All computed values with SIII force (see table 2) are larger than the isoscalar monopoles energies experimentally known [3]). This discrepancy is related to the density dependence of Skyrme interactions, which give too high a value of $\chi(r)$ at the center of the nucleus. One can correct this effect with a ρ^σ density dependence with $\sigma \leqq \frac{2}{3}$ – instead of $\sigma = 1$ in usual Skyrme forces – as proposed by some authors [30]) (see sect. 4).

Finally we point out that the values found for χ_A confirm the relation given in ref. [5]) between χ_A and χ^{NM} in the framework of Skyrme interactions:

$$\chi_A = \chi^{NM} - 63(\sigma + 1) \text{ [MeV]}. \tag{3.28}$$

Monopole isovector mode. In fig. 2 is plotted the symmetry energy density $E_s(r)$. It is close to its nuclear matter value in the center of the nucleus but shows, as $\chi(r)$, important surface effects. Nevertheless when one uses the CD approximation there are cancellations and the result obtained in heavy nuclei is rather satisfactory ($\sim 10\,\%$ discrepancy with the result obtained with the complete formula for heavy nuclei). Thus, if one is interested in the general trends, one can further simplify (3.19).

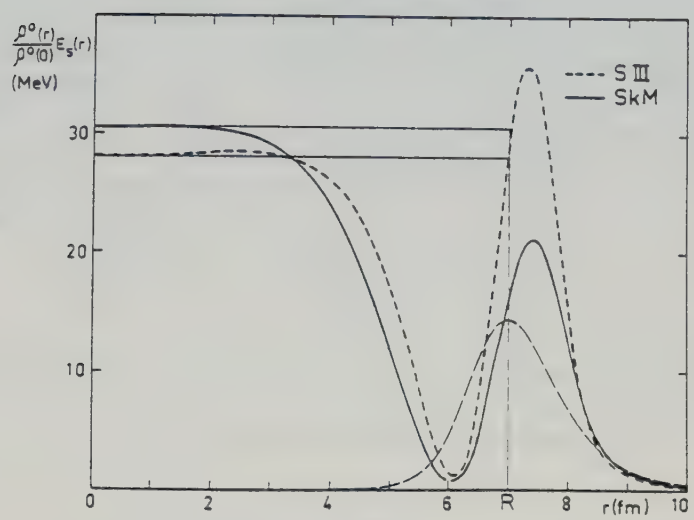


Fig. 2. Plot of the symmetry energy density $E_s(r)$ in ^{208}Pb [eq. (3.22)] for two different interactions: SIII and SkM (see subsect. 4.1). Thin lines correspond to the constant density (CD) approximation; $R = (\frac{3}{5})^{1/2} r_0$ is the mass radius. The long dotted curve represents, in arbitrary units, the weighting function of $E_s(r)$, appearing in the dipole case [eq. (3.33)].

The enhancement factor κ_{0v} reduces to $K\rho_0$, and eq. (3.19) can be rewritten

$$\hbar\omega_{0v} = \left[\frac{\hbar^2}{m} 18 \frac{E_s^{NM}(1+\kappa_{0v})}{r_0^2}\right]^{\frac{1}{2}} \tag{3.29}$$

showing up the role of the enhancement factor in the resonance energy. Taking again typical values – $E_s^{NM} \approx 32$ MeV, $\kappa_{0v} \approx 0.4$, $r_0^2 \approx 0.9 A^{\frac{2}{3}}$ fm^2 – eq. (3.29) gives $\hbar\omega_{0v} \approx 187 A^{-\frac{1}{3}}$ MeV which is close to the estimates given by other authors [31, 35]). However, as will be discussed in more detail in sect. 4, the surface effects are important enough to significantly modify this A-dependence. In fig. 3 are plotted the values of $\hbar\omega_{0v}$ in ^{208}Pb obtained with the complete expression (3.19) as a function of K for various Skyrme forces. As E_s^{NM} is roughly the same for all Skyrme forces, we see that formula (3.29) predicts the correct K-dependence of the result. So from the experimental knowledge of the isovector mode, even to within 50 %, one could estimate empirically $t_1 + t_2$ [see eq. (2.10)].

Let us now compare to the liquid drop model [31]) in which the different eigenmodes are given by

$$(\hbar\Omega_{n,i})_{LD} = \hbar c_i \frac{\gamma_{n,i}}{r_0}; \qquad i = s, v; \qquad n = 1, 2, \ldots, \tag{3.30}$$

with c_i having also the meaning of the velocity of sound. For the lowest frequency ($n = 1$), $\gamma_{1,s} = 2.43$, $\gamma_{1,v} = 3.48$. With the same equilibrium densities – i.e. CD approximation – our description, by use of formulae (3.23), (3.24), (3.27) and (3.29),

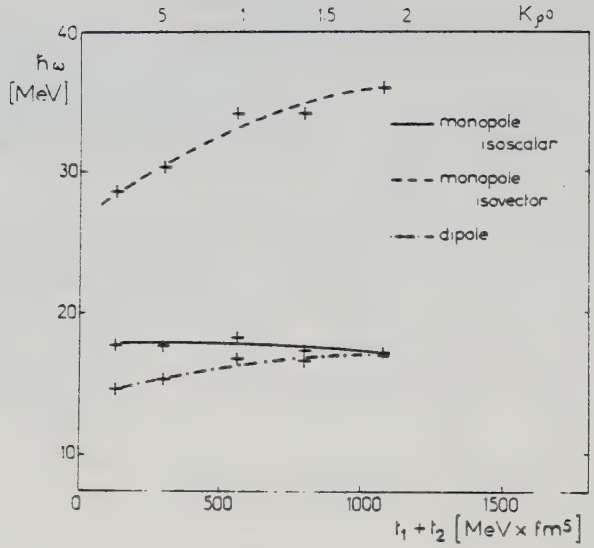


Fig. 3. Monopole and dipole frequencies in ^{208}Pb calculated with different Skyrme forces as functions of $K\rho^0$ (or of t_1+t_2).

leads to a similar expression for the frequencies of the resonances

$$\hbar\omega_i = \hbar c_i \frac{\gamma}{r_0}; \qquad i = \text{s, v}, \tag{3.31}$$

but with $\gamma = 3$. Sagawa and Holzwarth [11]) have shown that for the isoscalar case the energy $\hbar\omega_{0s}$ of the breathing mode can be obtained as an appropriate average $\langle\gamma_{n.s}\rangle$ of the eigenmodes (3.30); specifically, if the average is taken as the square root of the ratio of the cubic to the linear energy weighted sum rule of states (3.30) one obtains $\langle\gamma_{n.s}\rangle = 3$, recovering (3.31). This also explains the discrepancy between formulae (3.27a) and (3.27b). In sect. 4, when comparing with experimental data, we shall rather than (3.27) use the more microscopic formula (3.25), which includes surface effects. We presently consider a remarkable numerical accident the fact that formulae (3.25) and (3.27b) give in practice almost identical results, reflecting the numerical fact that $\chi_A \approx \frac{2}{3}\chi^{\text{NM}}$ [see also ref. [29])]. For the isovector case, we have not been able to connect (3.30) and (3.31). Notice however that presumably expression (3.31) should be compared to some average $\langle\gamma_{n.v}\rangle$ that would certainly give a result larger than the lowest value 3.48, in contradiction with our value $\gamma = 3$. We think that this question deserves further study.

Dipole mode. Expression (3.20) for the dipole frequency can be written

$$\hbar\omega_{1v} = \left[\frac{\hbar^2}{m}\frac{2}{3}\frac{\int\left[\frac{\rho^{0\prime}(r)}{\rho^0(r)}(1+2K\rho^0(r))\right]^2\rho^0(r)E_s(r)\mathrm{d}\boldsymbol{r}}{\int\rho^0(r)(1+K\rho^0(r))\mathrm{d}\boldsymbol{r}}\right]^{\frac{1}{2}}. \tag{3.32}$$

The presence of the $\rho_0'^2$ term in the numerator leads as expected for a GT mode (a surface mode) to an $A^{-1/6}$ dependence of the resonance energy. It should be noticed that the integrand in the numerator of (3.32) contributes only at the surface, i.e. at $\rho \approx \frac{1}{2}\rho_0$. So it is not the value of E_s at the equilibrium density of nuclear matter which is important here, but rather the shape of $E_s(r)$ at the surface. As will now be shown, this allows to roughly exhibit the K-dependence of the resonance energy. The factor can be replaced by its value at the point where $\rho = \frac{1}{2}\rho_0$ (where ρ_0' has its maximum value) and taken out of the integral. It cancels the $1 + K\rho_0$ factor (volume term) in the denominator once approximated using a CD approximation. Finally one gets the simplified formula

$$\hbar\omega_{1v} = \left[\frac{\hbar^2}{m}\frac{2}{3A}(1+\kappa_{1v})\int\left[\frac{\rho^{0\prime}(r)}{\rho^0(r)}\right]^2\rho^0(r)E_s(r)\mathrm{d}r\right]^{\frac{1}{2}}. \tag{3.33}$$

In fig. 2 is also plotted the weighting function $(\rho^{0\prime}/\rho^0)^2\rho^0 r^2$ of $E_s(r)$ illustrating the fact that the value of the dipole frequency (for the velocity field we have chosen) is determined by surface properties. Consequently, for this case the value of the symmetry energy of nuclear matter $E_s(0)$ is not the relevant parameter.

3.4. EFFECTIVE MASSES FOR ISOVECTOR MODES

Expressions (3.24), (3.29) and (3.33) suggest the introduction of an effective mass for each isovector mode. They absorb the effect of exchange forces (source term in the equation of continuity) and are respectively defined by

$$\left(\frac{m^*}{m}\right)_{0v} = \frac{1}{1+\kappa_{0v}}, \tag{3.34}$$

$$\left(\frac{m^*}{m}\right)_{1v} = \frac{1}{1+\kappa_{1v}}. \tag{3.35}$$

Let us remind that in the limit of a large system both effective masses coïncide

$$(m^*/m)_{0v} = (m^*/m)_{1v} = (m^*/m)_v. \tag{3.36}$$

Lorentz curve extrapolations of integrated photoabsorption cross sections [1]) indicate that, especially for heavy nuclei, typical values of the enhancement factor are $\kappa_{1v} \approx 0.4$ leading to $(m^*/m)_{1v} \approx 0.7$ (value that is reproduced, for instance, by interaction SIII – see table 3). This value coïncides with that of Myers *et al.* [32]), introduced as a free parameter in the collective kinetic energy to fit the experimental data along the periodic table. In the dynamical liquid droplet model of Myers *et al.*, the question of the possible relation between this effective mass and the usual one (related to the non-locality of the average field) is left opened [33]). We show, as suggested in [32]), that the origin of this effective mass is due to the exchange component of the interaction. It is worthwhile pointing out that it does not coïncide with the effective mass as defined in eq. (2.4): with Skyrme forces the former one

is related to the combination t_1+t_2 whereas the second one to $3t_1+5t_2$. Notice however that numerically both masses are very close (see table 4).

It should be pointed out that what we have called a typical value of the enhancement factor ($\kappa_{1v} \approx 0.4$) is ambiguous, not for lack of experimental information but because

TABLE 4

Comparison between effective masses and isovector effective masses in nuclear matter for various Skyrme forces

	SVI	SkM	SIII	SII	SIV	SV
$\frac{m^*}{m}$	0.95	0.79	0.76	0.58	0.47	0.38
$\left(\frac{m^*}{m}\right)_v$	0.81	0.66	0.65	0.50	0.42	0.35

of limitations of the present approach, in which, in particular, effects of short-range correlations are certainly not present. So we prefer to use Lorentz curve extrapolations based on the giant resonance rather than use the experimental information from higher energies.

4. On the effective interaction

4.1. INFLUENCE OF THE PARAMETERS OF THE EFFECTIVE INTERACTION ON THE RESULTS

It is known that Skyrme forces are underdetermined by the static properties of nuclei. They give similar results for the bulk properties (total energy, mean radius) in the static case, but, as can be seen in fig. 3, (i) the isovector monopole and dipole energies are significantly different for different Skyrme forces; (ii) the isoscalar monopole resonance is too high compared to the experimental data [3]) and (iii) the isovector dipole resonance is also too high. Let us also recall that the observed location of the giant electric isoscalar quadrupole resonance can be shown to lead to an estimate of the effective mass $m^*/m \approx 0.8$ [see e.g. ref. [5])]. We shall now briefly illustrate, how we can use the previous study to construct a schematic interaction which keeping the agreement with experiment for the bulk properties takes into account some experimental dynamical constraints (systematics on giant electric resonances).

As already mentioned, if one modifies the density-dependent part of the interaction so as to lower the incompressibility modulus in nuclear matter χ^{NM}, it is possible to obtain a monopole isoscalar energy in agreement with experiment. As an example, we chose the power of the density-dependent term $\sigma = \frac{1}{6}$ and $\chi^{NM} \approx 220$ MeV. We have also seen that the too high value of the dipole energy is due to the shape of the volume symmetry energy E_s near the nuclear surface. Indeed it is possible to modify

its behaviour without altering the value at the saturation point by changing the value of the exchange part of the density-dependent component of the Skyrme interaction; namely the value of x_3, which is usually taken as 1. We chose $x_3 = 0$ [see also ref. [34])]. The other parameters, given in table 5, are then determined by maintaining a correct description of the static properties of nuclei. We give in tables 6 and 7 results obtained with this force hereafter referred as SkM; results with Skyrme III force and Köhler force Ska are also included for comparison. In table 6 are given the parameters of nuclear matter, in table 7 results corresponding to ^{208}Pb. The static results are obtained as explained in detail in ref. [18]) (the spin-orbit force is neglected). Consequently to the parameters of the force SkM given in table 5 should be added the value $W_0 = 130$ MeV · fm^5 if one wants to include the spin-orbit term. This term gives extra binding and produces agreement with experiment for the binding energy. As can be seen by comparing results in tables 7 and 8, the

TABLE 5

Parameters of the force SkM

	t_0 [MeV · fm^3]	t_1 [MeV · fm^5]	t_2 [MeV · fm^5]	t_3 [MeV · fm^6]	x_0	x_3	σ
SkM	−2645	385	−120	15595	0.09	0	1/6

TABLE 6

Nuclear matter parameters of the force SkM specified in table 5

	E/A (MeV)	k_F (fm^{-1})	E_s (MeV)	χ (MeV)	$\frac{m^*}{m}$	$\frac{m^*}{m}_v$
SIII	−15.9	1.29	28.2	356	0.76	0.65
SkM	−15.8	1.33	31.0	220	0.79	0.66
Ska	−16.0	1.32	32.9	263	0.61	0.51

Energy per particle E/A, Fermi momentum k_F, symmetry energy E_s, incompressibility χ, effective mass m^*/m, isovector effective mass $(m^*/m)_v$. Corresponding values of SIII [ref. [20])] and Ska [ref. [34])] are included for comparison.

TABLE 7

	E/A (MeV)	r_0 (fm)	κ_{0v}	κ_{1v}	$\hbar\omega_{0s}$ (MeV)	$\hbar\omega_{0v}$ (MeV)	$\hbar\omega_{1v}$ (MeV)
SIII	−7.22	5.65	0.392	0.422	17.8	30.5	15.3
SkM	−7.26	5.64	0.349	0.375	14.0	27.7	13.8
SKa	−7.23	5.67	0.613	0.689	15.6	30.9	14.9

Energy per particle E/A, r.m.s. radius r_0, monopole (κ_{0v}) and dipole (κ_{1v}) enhancement factors, isoscalar (isovector) monopole $\hbar\omega_{0s}(\hbar\omega_{0v})$ and dipole $\hbar\omega_{1v}$ resonance energies of ^{208}Pb obtained with the force SkM specified in table 5. Corresponding values of SIII [ref. [20])] and Ska [ref. [34])] are included for comparison

calculated values of $\hbar\omega_{0s}$ and $\hbar\omega_{1v}$ obtained with forces Ska and SIII are too high compared to the experimental resonance energies.

To illustrate the role of x_3, in fig. 4 is plotted the value of E_s as a function of ρ in nuclear matter for two forces having the same value of E_s at the saturation density ρ^0. The full line represents $E_s(\rho)$ for the force SkM (table 5), the dashed line corresponds to a force with $x_1 = 1$ (like in SIII) but with a value of x_0 modified in order

TABLE 8

Energies in MeV of giant resonances

	$L = 0$			$L = 1$	$T = 1$
	$T = 0$		$T = 1$		
	PW (SkM)	exp	PW (SkM)	PW (SkM)	exp
^{16}O	25.3		39.9	22.7	24
^{40}Ca	21.5		36.9	19.8	20
^{58}Ni	19.6	~ 20	35.2	18.5	18.5
^{90}Zr	17.3	16.2–17.5	32.6	16.7	16.7
^{120}Sn	16.2	15.6–17	30.9	15.7	15.4
^{144}Sm	15.1	14.8–15.5	30.2	15.1	15.3
^{197}Au	14.1	~ 13.6	28.1	14.0	13.7
^{208}Pb	14.0	13.2–13.7	27.7	13.8	13.4

PW indicates the results obtained in the present work using the force SkM, whose parameters are listed in table 5. The experimental values are taken from: ref. [3]) for $L = 0$ $T = 0$; ref. [1]) for $L = 1$ $T = 1$.

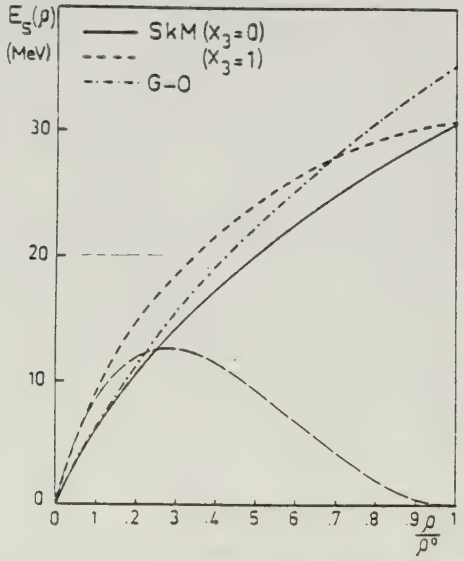


Fig. 4. Plot of the function $E_s(\rho)$ in nuclear matter as a function of ρ/ρ^0 for two choices of the parameter x_3. For comparison, the same function has also been calculated for the force G0 of Campi-Sprung [37]). The long dotted curve represents, in arbitrary units, the weighting function of $E_s(\rho)$ appearing in the dipole case [eq. (3.33)], obtained for the case of ^{208}Pb with a Fermi distribution.

to have the same value $E_s(\rho^0)$. One can see that in going from $x_3 = 1$ to $x_3 = 0$ and keeping the value of $E_s(\rho^0)$ constant, the value of $E_s(\rho)$ for $\rho < \rho^0$ is decreased. Also plotted for comparison is the function $E_s(\rho)$ obtained with the force, derived from the Reid soft-core potential, of Campi-Sprung [37]). Also included in the figure (long dotted curve) is the weighting function of $E_s(\rho)$ appearing in the dipole case (eq. (3.33)), for the case of ^{208}Pb. One can see that what determines the dipole energy $\hbar\omega_{1v}$ is not the value of E_s at the saturation density ρ_0 but rather the value of E_s in the region around $\frac{1}{2}\rho^0$. So, for instance, despite the fact that $E_s(\rho^0)$ is higher for SkM than for SIII, $E_s(\frac{1}{2}\rho^0)$ is lower for the former than for the later one and thus the dipole energy $\hbar\omega_{1v}$ is also consequently lower. To this effect is added (see fig. 2) a damping of the oscillations near the surface of the curve $E_s(r)$ in the nucleus. This damping is also seen in the curve $\chi(r)$ and is related to the fact that lowering the incompressibility, one increases the surface thickness and consequently decreases the effects of the gradient terms.

Results for the resonance energies with the force SkM are given in table 8. As can be seen one can achieve agreement with experimental data for the $L = T = 0$ and $L = T = 1$ modes without loss of agreement with the experimental static properties. Remembering that this agreement reflects essentially that the compression and symmetry properties of the model are correct, we consider the predicted values for the isovector monopole mode as quite reliable. Notice also that, despite the fact that in the limit of a large system the mass dependence of the resonance energies given by eqs. (3.27a) and (3.29) are $A^{-\frac{1}{3}}$ for the monopole cases, the results presented in table 8 are best parametrized with a $\sim 53\, A^{-\frac{1}{3}}$ MeV ($\sim 68\, A^{-\frac{1}{3}}$ MeV) mass dependence for the monopole isoscalar (isovector) case respectively. The change from a $A^{-\frac{1}{3}}$ to a lower mass dependence is due to the presence of surface effects (see figs. 1 and 2) and will be discussed in more detail elsewhere. This change in A-dependence, especially pronounced for the $L = 0$, $T = 1$ case, has also been observed in ref. [36]). The fact that the dipole energies are well parametrized with a $A^{-\frac{1}{3}}$ dependence ($\sim 35\, A^{-\frac{1}{3}}$ MeV) is due to the choice made for the velocity field (eq. (3.10)) and which corresponds to the Goldhaber-Teller mode.

We present this analysis to illustrate that a simple approach to giant resonances, as the present one, provides supplementary constraints on the values of the parameters of the effective forces. These constraints may be useful when using effective interactions to describe more complicated dynamical phenomena as, for instance, collision of two ions. However the force presented here is not optimized; to improve it is beyond the scope of this work.

4.2. CONNECTION WITH LANDAU PARAMETERS

The approach proposed in the present paper is very similar to Landau's description of collective modes for an infinite system. It is then possible to write

the given expressions for the collective frequencies in terms of the parameters of the Landau particle-hole interaction $f(k, k')$ [38])

$$f(k, k') = \frac{\pi^2}{2m^* k_F^2}[F + F'\tau_1 \cdot \tau_2 + G\sigma_1 \cdot \sigma_2 + G'\tau_1 \cdot \tau_2\, \sigma_1 \cdot \sigma_2],$$
$$f(k, k') = f_0 + k \cdot k' f_1, \tag{4.1}$$

If we compute the Landau parameters of Skyrme forces we can verify that we recover, in the limit of a large system, the usual expressions [39]) for the incompressibility χ, the effective mass m^*/m, the symmetry energy E_s, and the isovector (or dipole) enhancement factor κ_{1v}.

$$\chi^{NM} = 6\frac{\hbar^2 k_F^2}{2m^*}(1 + F_0), \tag{4.2}$$

$$\frac{m^*}{m} = 1 + \tfrac{1}{3}F_1, \tag{4.3}$$

$$E_s = \frac{1}{3}\frac{\hbar^2 k_F^2}{2m^*}(1 + F_0'), \tag{4.4}$$

$$1 + \kappa_{1v} = (1 + \tfrac{1}{3}F_1')/(1 + \tfrac{1}{3}F_1). \tag{4.5}$$

We give in table 9 the values of the Landau parameters of SIII, Ska and the force introduced in the preceding subsection SkM. Also included for comparison are the

TABLE 9

Landau parameters for the forces

	F_0	F_0'	F_1	F_1'	S
SIII	0.30	0.87	−0.71	0.49	0.19
Ska	−0.26	0.66	−1.17	0.55	−1.42
SkM	−0.20	0.96	−0.64	0.58	−0.01
Sjöberg	−0.37	0.56	−0.69	0.45	−0.73

SIII [ref. [20])], Ska [ref. [34])], SkM (table 5), Sjöberg [ref. [40])] and their contribution S to Landau's sum rule.

values computed by Sjöberg [40]), derived from the Reid soft-core potential. In the last column of the table we give the partial contribution S of the terms F_0, F_0', F_1 and F_1' to Landau's sum rule. We do not give the values of the parameters G because we think that they are meaningless at the present stage. Our understanding is that only when information on magnetic properties will be introduced in the effective interaction it will make sense to compute them. Up to now, the experimental information that has been included in addition to the static properties is:

(i) giant monopole and quadrupole isoscalar energies, which constrain χ^{NM} and m^* (or F_0 and F_1);

(ii) dipole energies which constrain the symmetry energy (or F_0');

(iii) integrated photonuclear cross sections which constrain the dipole enhancement factor (or F_1' and F_1).

It is however worthwhile to notice that the Skyrme parametrization, through the exchange terms x_1 and x_2 which are up to now being kept equal to zero, has still flexibility in order to describe magnetic properties. Notice also that no hope remains to fulfil Landau's sum rule with the interaction SkM: the contribution of the G terms should be certainly positive and relatively large whereas we have up to now a partial sum which is negative but extremely small in absolute value. Keep however in mind that relatively small and may be acceptable changes in the different quantities discussed may substantially affect the sum rule in the right direction. So, for instance, by modifying k_F from 1.33 to 1.29 fm^{-1}, χ from 220 to 200 MeV, E_s from 31 to 28 MeV, m^*/m from 0.79 to 0.75 and κ_{1v} from 0.52 to 0.20 (see table 6), one changes the partial sum rule S from ~ 0 to ~ -1.5. Whether this changes are acceptable and whether the fulfilment of Landau's sum rule is very significant is presently not clear to the authors.

5. Summary and conclusions

Starting from the TDHF equations and a schematic interaction of the Skyrme type, including density-dependent as well as momentum-dependent terms, we have derived an approach to nuclear vibrations in which only macroscopic densities and velocity fields appear. We have emphasized the specific role of the momentum-dependent terms, which imitate closely the usual charge exchange forces: they give rise to a source term in the equations of continuity and to a correction term to the collective classical kinetic energy. It has been shown how a hamiltonian density that includes this nonclassical feature (exchange) can be constructed.

We have applied the method just outlined to the description of nuclear electric monopole and dipole vibrations. Instead of solving the differential equations we are lead to, we assume for each mode – E0, $T = 0$ and $T = 1$, and E1, $T = 1$ – specific forms for the velocity fields which correspond to the breathing mode for the monopole case and to the surface Goldhaber-Teller mode for the dipole case. By comparing the resulting resonance energies to the ones obtained from self-consistent RPA sum rule approaches, we conclude that the method proposed here is reliable. The formulae obtained for the eigenfrequencies lead naturally to define incompressibility and symmetry energy densities that in the limit of a large system coïncide with standard definitions. The importance of surface effects is discussed and emphasized. Via some further approximations we are able to give the final results in closed form. We also compare to the classical dynamical liquid-droplet model. It is shown how the effective dipole mass introduced previously phenomenolog-

ically comes out naturally form our approach. We think we can reliably predict the location of the monopole isovector state. The expression giving the collective energies are simple enough to relate the final result to the various parameters characterizing the effective interaction we have started with. This allows in particular the construction of more elaborated effective interactions, in the sense that keeping the agreement with static properties, will in addition be in agreement with some observed features of the giant states. Specifically, the location of the isoscalar monopole and giant dipole energies is correctly reproduced.

We finally compare our results in the limit of a large system with the ones obtained in the framework of the Landau theory. The constraints put by the experimental information about electric monopole and quadrupole isoscalar states, electric isovector dipole resonances and integrated photoabsorption cross sections on the Landau parameters of the particle-hole interaction are discussed.

The method presented in this paper is fully self-consistent but does not contain shell effects. If they can be neglected, it can be applied to any nucleus and is especially suited when the properties considered are smooth functions of the mass number. When compared to more microscopic approaches as RPA, the method proposed has the advantage of leading to simpler formulae and calculations, giving thus in some cases more physical insight. However it is unable to predict at the present stage resonance widths, which represents a severe limitation.

When deformations of the Fermi sphere in the kinetic energy functional are taken into account [23]), the method presented can also be used to study vibrations more general than the ones investigated here; in particular electric quadrupole resonances (isoscalar and isovector) as well as the coupling of the Goldhaber-Teller and Steinwedel-Jensen modes. Finally, let us mention that connexions between ATDHF hydrodynamics [6]) and the present method should be made. Work in this direction is in progress.

G. Holzwarth and C. Sidi are warmly acknowledged for interesting discussions.

Appendix A

We derive eq. (2.12) from the TDHF equations written with a Skyrme interaction [12]) namely

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \rho_q(r, r') = \frac{\hbar^2}{2m_q^{*\prime}} \Delta' \rho_q(r, r') - \frac{\hbar^2}{2m_q^*} \Delta \rho_q(r, r') + \nabla' \frac{\hbar^2}{2m_q^{*\prime}} \cdot \nabla' \rho_q(r, r')$$
$$- \nabla \frac{\hbar^2}{2m_q^*} \cdot \nabla \rho_q(r, r') + [U_q(r) - U_q(r')] \rho_q(r, r') + \frac{1}{2i} \{2[I_q' \cdot \nabla' \rho_q(r, r')$$
$$+ I_q \cdot \nabla \rho_q(r, r')] + \rho_q(r, r')[\operatorname{div} I_q + \operatorname{div} I_q']\}, \qquad q = \text{n, p.} \tag{A.1}$$

In eq. (A.1) and in what follows we do not write the time dependence to shorten the notation: ∇ stands for ∇_r, ∇' for $\nabla_{r'}$ and Δ' for $\Delta_{r'}$. We apply $\nabla - \nabla'$ to both sides of eq. (A.1) and take the limit $r \to r'$. For the l.h.s. of (A.1), we first note that

$$(\nabla - \nabla')\rho_q(r, r') = \sum_{z_q} [\varphi_{z_q}(r')\nabla\varphi_{z_q}(r) - \varphi_{z_q}(r)\nabla'\varphi_{z_q}(r')] \exp\{i(m/\hbar)[S_{z_q}(r) - S_{z_q}(r')]\}$$

$$+ \sum_{z_q} \varphi_{z_q}(r)\varphi_{z_q}(r')i(m/\hbar)[\nabla S_{z_q}(r) + \nabla' S_{z_q}(r')] \exp\{i(m/\hbar)[S_{z_q}(r) - S_{z_q}(r')]\}.$$

Taking the derivative with respect to time and the limit when $r \to r'$, one gets

$$i\hbar \lim_{r \to r'} \frac{\partial}{\partial t} (\nabla - \nabla')\rho(r, r') = 2m \frac{\partial}{\partial t} (\rho_q u_q). \tag{A.2}$$

The calculation of the r.h.s. of eq. (A.1) after application of $\nabla - \nabla'$ is straightforward. One finally obtains

$$2m \frac{\partial}{\partial t} \rho_q u_q^i = 2 \frac{\hbar^2}{2m_q^*} \sum_{z_q} \left\{ \varphi_{z_q}^2 \nabla_i \left(\frac{\Delta\varphi_{z_q}}{\varphi_{z_q}} \right) - 2 \frac{m^2}{\hbar^2} \nabla \cdot (\varphi_{z_q}^2 \nabla S_{z_q} \nabla_i S_z) \right\}$$

$$+ 2 \left(\nabla_i \frac{\hbar^2}{2m_q^*} \right) \sum_{z_q} \left\{ \Delta\varphi_{z_q} - \frac{m^2}{\hbar^2} \varphi_{z_q} (\nabla S_{z_q})^2 \right\} \varphi_{z_q} + 2\nabla_i \left(\nabla \frac{\hbar^2}{2m_q^*} \right) \cdot \sum_{z_q} \varphi_{z_q} \nabla \varphi_{z_q}$$

$$+ 2\nabla \left(\frac{\hbar^2}{2m_q^*} \right) \cdot \sum_{z_q} \{ \varphi_{z_q} \nabla_i \nabla \varphi_{z_q} - \nabla_i \varphi_{z_q} \nabla \varphi_{z_q} \} - 2\rho \nabla_i U_q(r)$$

$$+ 2I_q \frac{im}{\hbar} \cdot \left[\sum_{z_q} \varphi_{z_q} \nabla_i \varphi_{z_q} \nabla S_{z_q} + \varphi_{z_q}^2 \nabla_i \nabla S_{z_q} + 2\varphi_{z_q} \nabla \varphi_{z_q} \nabla_i S_{z_q} \right]$$

$$+ 2\nabla_i I_q \frac{im}{\hbar} \cdot \sum_{z_q} \varphi_{z_q}^2 \nabla S_{z_q} + 2 \operatorname{div} I_q \frac{im}{\hbar} \sum_{z_q} \varphi_{z_q}^2 \nabla_i S_{z_q}, \tag{A.3}$$

$$i = x, y, z.$$

If one neglects all terms quadratic in ∇S_{z_q}, one is left with

$$m \frac{\partial}{\partial t} \rho u_q^i = - \sum_{z_q} \varphi_z^2 \nabla_i \left\{ \frac{\varphi_{z_q} \nabla \cdot \left(- \dfrac{\hbar^2}{2m_q^*} \nabla \varphi_{z_q} \right)}{\varphi_{z_q}^2} \right\} - \rho \nabla_i U_q(r). \tag{A.4}$$

Next we assume that at each time the wave functions $\psi_{z_q}(r)$ (eq. 2.5)) are nearly solutions of a set of static HF equations. Neglecting all terms quadratic in ∇S_z, one gets, for their real part

$$- \frac{\hbar^2}{2m_q^*} \varphi_{z_q} \frac{\Delta\varphi_{z_q}}{\varphi_{z_q}} - \nabla \left(\frac{\hbar^2}{2m_q^*} \right) \cdot \varphi_{z_q} \frac{\nabla \varphi_{z_q}}{\varphi_{z_q}} + U_q(r)\varphi_{z_q} = \varepsilon_{z_q} \varphi_{z_q}. \tag{A.5}$$

After some algebra and applying ∇_i on both sides of eq. (A.5) one obtains

$$\nabla_i \left\{ \frac{\varphi_{\alpha_q} \nabla \cdot \left(-\frac{\hbar^2}{2m_q^*} \nabla \varphi_{\alpha_q} \right)}{\varphi_{\alpha_q}^2} \right\} = \nabla_i [\varepsilon_{\alpha_q} - U_q(r)];$$

the r.h.s. is trivially α_q independent, so is also the l.h.s.

Thus one can factorize the first term of the r.h.s. of eq. (A.4) and obtain

$$m \frac{\partial}{\partial t} \rho_q u_q^i = -\rho_q \nabla_i \left\{ \frac{1}{A_q} \sum_{\alpha_q} \frac{1}{\varphi_{\alpha_q}} \left[\nabla \cdot \left(-\frac{\hbar^2}{2m_q^*} \nabla \varphi_{\alpha_q} \right) + U_q(r) \varphi_{\alpha_q} \right] \right\}, \tag{A.6}$$

where $A_q = N$ or Z.

Finally we show that the r.h.s. of (A.6) is just the variation of H with respect to ρ_q: if one assumes that the hamiltonian density is a functional of ρ_q and $\nabla \rho_q$ only, it is easy to see that the variation of the energy E due to a change $\delta \rho_q$ can be written

$$\delta E = \int \mathrm{d}r \left\{ \frac{\partial H}{\partial \rho_q} - \nabla \cdot \frac{\partial H}{\partial \nabla \rho_q} \right\} \delta \rho_q = 2 \sum_{\alpha_q} \int \mathrm{d}r \left\{ \frac{\partial H}{\partial \rho_q} - \nabla \cdot \frac{\partial H}{\partial \nabla \rho_q} \right\} \varphi_{\alpha_q} \delta \varphi_{\alpha_q}.$$

One can see in ref. [17]) that δE is also given by

$$\delta E = 2 \sum_{\alpha_q} \int \mathrm{d}r \delta \varphi_{\alpha_q} \left\{ -\nabla \cdot \left(-\frac{\hbar^2}{2m_q^*} \nabla \varphi_{\alpha_q} \right) + U_q(r) \varphi_{\alpha_q} \right\}.$$

As $\delta \varphi_{\alpha_q}$ are arbitrary

$$\left(\frac{\partial H}{\partial \rho_q} - \nabla \cdot \frac{\partial H}{\partial \nabla \rho_q} \right) \varphi_{\alpha_q} = -\nabla \cdot \left(-\frac{\hbar^2}{2m_q^*} \nabla \varphi_{\alpha_q} \right) + U_q(r) \varphi_{\alpha_q},$$

which completes the proof.

Appendix B

We show that, starting from the lagrangian density (2.18), using a classical Euler variational principle [16]) and the equations of continuity (2.6) as constraints, one obtains the set of equations (2.20).

The action integral I is stationary with respect to the 8 variations $\delta \rho_q$, $\delta u_{q,i}$ (q = n, p and $i = x, y, z$)

$$\delta I = \delta \int \mathrm{d}t \int \mathrm{d}r \left\{ \mathscr{L}(\rho_q, u_q) - h_\mathrm{n} \left[\frac{\partial \rho_\mathrm{n}}{\partial t} + \operatorname{div} \rho_\mathrm{n} u_\mathrm{n} - K \operatorname{div} \rho_\mathrm{n} \rho_\mathrm{p} (u_\mathrm{p} - u_\mathrm{n}) \right] \right.$$
$$\left. - h_\mathrm{p} \left[\frac{\partial \rho_\mathrm{p}}{\partial t} + \operatorname{div} \rho_\mathrm{p} u_\mathrm{p} - K \operatorname{div} \rho_\mathrm{n} \rho_\mathrm{p} (u_\mathrm{n} - u_\mathrm{p}) \right] \right\} = 0, \tag{B.1}$$

where the functions h_n and h_p are two Lagrange multipliers. Variation with respect to ρ_n leads to

$$\int dt \int dr \left\{ \left[\tfrac{1}{2} m u_n^2 + \tfrac{1}{2} m K \rho_p (u_n - u_p)^2 - \frac{\delta H}{\delta \rho_p} \right] \delta \rho_n \right.$$

$$\left. - h_n \left[\frac{\hat{c} \delta \rho_n}{\hat{c} t} + \operatorname{div} \delta \rho_n u_n - K \operatorname{div} \rho_p \delta \rho_n (u_p - u_n) \right] - h_p K \operatorname{div} \rho_p \delta \rho_n [u_p - u_n] \right\} = 0. \tag{B.2}$$

After integrating by parts first with respect to t and then with respect to the space variables, one is left with

$$\tfrac{1}{2} m u_n^2 + \tfrac{1}{2} m K \rho_p (u_n - u_p)^2 - \frac{\delta H}{\delta \rho_n} + \frac{\hat{c} h_n}{\hat{c} t} + u_n \cdot \nabla h_n + K (u_n - u_p) \rho_p \cdot \nabla (h_n - h_p) = 0. \tag{B.3}$$

Variations with respect to the components of u_n, after integration by parts, leads to

$$m u_n + m K \rho_p (u_n - u_p) + \nabla h_n + K \rho \nabla (h_n - h_p) = 0. \tag{B.4}$$

Variations with respect to the components of u_p gives an equation identical to (B.4) but with n $\leftrightarrow$ p. The difference of both equations can be written

$$m(u_n - u_p) = -\nabla (h_n - h_p). \tag{B.5}$$

Inserting (B.5) into (B.4), one gets

$$m u_n = -\nabla h_n. \tag{B.6}$$

Thus the Lagrange function multiplier h_q appear as the velocity potentials – which proves that the motion is irrotational.

Substracting the spatial derivative of (B.3) from the time-derivative of (B.4), one gets

$$m \frac{\hat{c} u_n}{\hat{c} t} + m K \frac{\hat{c}}{\hat{c} t} \rho_p (u_n - u_p) + K \frac{\hat{c}}{\hat{c} t} [\rho_p \nabla (h_n - h_p)]$$

$$- \nabla \left[\tfrac{1}{2} m u_n^2 - \frac{\partial H}{\delta \rho_n} + u_n \cdot \nabla h_n \right]$$

$$- K \nabla [\rho_p (u_n - u_p) \cdot \nabla (h_n - h_p) + \tfrac{1}{2} m \rho_p (u_n - u_p)^2] = 0. \tag{B.7}$$

Inserting (B.6) in (B.7), one finally obtains eqs. (2.20).

Appendix C

To simplify we shall assume that $\rho_n^0 = \rho_p^0$ and neglect the Coulomb field. From eqs. (3.4) and (3.12) one gets

$$\varepsilon_{0s} = \sqrt{2\frac{\hbar^2}{m}\frac{1}{\hbar\omega_{0s}}\frac{1}{Ar_0^2}}, \qquad (L=0, T=0), \tag{C.1}$$

$$\varepsilon_{0v}\beta_v = \sqrt{2\frac{\hbar^2}{m}\frac{1}{\hbar\omega_{0v}}\frac{1}{Ar_0^2(1+\kappa_{0v})}}, \qquad (L=0, T=1), \tag{C.2}$$

$$\varepsilon_{1v} = \sqrt{2\frac{\hbar^2}{m}\frac{1}{\hbar\omega_{1v}}\frac{1}{Ar_0^2(1+\kappa_{1v})}}, \qquad (L=1, T=1), \tag{C.3}$$

where A is the mass number, r_0^2 is the mean square radius, κ_{0v} and κ_{1v} are the enhancement factors given in eqs. (3.14) and (3.17) and $\hbar\omega$ the different resonance energies involved. One sees that when β_v goes to infinity, the product $\varepsilon_{0v}\beta_v$ which determines the amplitude of the vibration remains finite and much less than one insuring that the assumption $\rho_q^1(r)/\rho_q^0(r) \ll 1$ is valid. Eqs. (C.1)–(C.3) also show that this assumption is more justified the bigger the nucleus is.

It can be easily shown that the transition densities of neutrons (or protons) in the monopole isoscalar and isovector modes are very similar. Using eq. (3.8), the ratio $\mathscr{R}$ of transition densities is given by

$$\mathscr{R} = \frac{\varepsilon_{0s}}{\varepsilon_{0v}\beta_v}\frac{(3+r\mathrm{d}/\mathrm{d}r)\rho^0}{(3+r\mathrm{d}/\mathrm{d}r)\rho^0(1+K\rho^0)} \tag{C.4}$$

and using formulae (C.1) and (C.2), we obtain

$$\mathscr{R} = \sqrt{\frac{\omega_{0v}}{\omega_{0s}}(1+\kappa_{1v})}\frac{(3+r\mathrm{d}/\mathrm{d}r)\rho^0}{(3+r\mathrm{d}/\mathrm{d}r)\rho^0(1+K\rho^0)} \tag{C.5}$$

Making now the approximation that $\rho^0(r)$ is constant in the nucleus up to a distance R and 0 outside and neglecting derivative terms, one gets

$$\mathscr{R} = \sqrt{\frac{\hbar\omega_{0v}}{\hbar\omega_{0s}}\frac{1}{1+K\rho^0}}. \tag{C.6}$$

Using typical values for $K\rho^0 \approx 0.5$ and $\hbar\omega_{0v} \lesssim 2\hbar\omega_{0s}$ one sees that $\mathscr{R}$ is of the order of unity.

References

1) B. L. Berman and S. C. Fultz, Rev. Mod. Phys. **47** (1975) 713;
R. Bergère, Features of the giant dipole resonance in photonuclear reactions, in Lecture notes in Physics, vol. 61 (Springer, Berlin, 1977);
J. Ahrens *et al.*, Nucl. Phys. **A251** (1975) 479
2) F. E. Bertrand, Ann. Rev. Nucl. Sci. **26** (1976) 457
3) N. Marty *et al.*, Proc. Int. Symp. on highly excited states in nuclei, Jülich 1975, p. 17; Orsay Report IPNO/PhN 75–11;
D. H. Youngblood, C. M. Rozsa, J. M. Moss, D. R. Brown and J. O. Bronson, Phys. Rev. Lett. **39** (1977) 1188;
M. N. Harakeh, K. van der Borg, T. Ishimatsu, H. P. Morsek, A. van der Woude and F. E. Bertrand, Phys. Rev. Lett. **38** (1977) 676;
F. E. Bertrand, G. R. Satchler, D. H. Horen and A. van der Woude, Phys. Lett. **80B** (1979) 198
4) G. F. Bertsch and S. F. Tsai, Phys. Reports **18C** (1975) 126;
K. F. Liu and G. E. Brown, Nucl. Phys. **A265** (1976) 385;
J. P. Blaizot, Thèse, Université de Paris, 1977;
K. F. Liu and Nguyen van Giai, Phys. Lett. **65B** (1976) 23;
S. Krewald, V. Klemt, J. Speth and A. Faessler, Nucl. Phys. **A281** (1977) 166;
V. Bernard, Thèse de 3ème Cycle, Orsay 1978;
J. P. Blaizot and D. Gogny, Nucl. Phys. **A284** (1977) 429
5) O. Bohigas, A. M. Lane and J. Martorell, Phys. Reports **51** (1979) 267
6) M. J. Giannoni, D. Vautherin, M. Vénéroni and D. M. Brink, Phys. Lett. **63B** (1976) 8
7) C. Y. Wong, J. A. Maruhn and T. A. Welton, Nucl. Phys. **A253** (1975) 469
8) G. Bertsch and K. Stricker, Phys. Rev. **C13** (1976) 1312
9) G. Bertsch, Nucl. Phys. **A249** (1975) 253
10) S. Stringari, Nucl. Phys. **A279** (1977) 454
11) H. Sagawa and G. Holzwarth, Prog. Theor. Phys. **59** (1978) 1213
12) Y. M. Engel, D. M. Brink, K. Goeke, S. J. Krieger and D. Vautherin, Nucl. Phys. **A249** (1975) 215
13) F. Moreau, Thèse de 3ème cycle, Orsay 1977
14) S. Fallieros, Electromagnetic interactions and nuclear excitations, Lecture Notes, Institut de Physique Nucléaire, Orsay 1975
15) L. Landau and E. Lifchitz, Mécanique des fluides, (Edition Mir, Moscou, 1971)
16) W. Yourgrau and S. Mandelstam, Variational principles in dynamics and quantum theory, (Pitman, London, 1968).
17) D. Vautherin and D. M. Brink, Phys. Rev. **C5** (1973) 626
18) H. Krivine and J. Treiner, Phys. Lett. B, in press
19) O. Bohigas, X. Campi, H. Krivine and J. Treiner, Phys. Lett. **64B** (1976) 381
20) M. Beiner, H. Flocard, Nguyen van Giai and P. Quentin, Nucl. Phys. **A238** (1975) 29
21) J. W. Negele and D. Vautherin, Phys. Rev. **C5** (1972) 1472; Phys. Rev. **C11** (1975) 1031;
D. W. L. Sprung, M. Vallières, X. Campi and Che-Ming Ko, Nucl. Phys. **A253** (1975) 1;
J. Treiner and H. Krivine, J. of Phys. **G2** (1976) 285;
X. Campi and A. Bouyssy, Phys. Lett. **73B** (1978) 263
22) J. Martorell, O. Bohigas, S. Fallieros and A. M. Lane, Phys. Lett. **60B** (1976) 313
23) G. Holzwarth and G. Eckart, Z. Phys. **A284** (1978) 291
24) J. C. Brennan and C. Werntz, Phys. Rev. **C5** (1970) 1679
25) D. M. Brink and R. Leonardi, Nucl. Phys. **A258** (1976) 285;
S. Stringari, E. Lipparini, G. Orlandini, M. Traini and R. Leonardi, Nucl. Phys. **A309** (1978) 177
26) O. Bohigas and D. Vautherin, to be published
27) K. F. Liu, Thesis, Stony Brook 1975
28) C. Y. Wong, Phys. Rev. **C17** (1978) 1832
29) J. S. Blaizot, D. Gogny and B. Grammaticos, Nucl. Phys. **A265** (1976) 315
30) L. Zamick, Phys. Lett. **45B** (1973) 313
31) A. Bohr and B. R. Mottelson, Nuclear Structure, vol. II (Benjamin New York, 1975)
32) W. D. Myers, W. J. Swiatecki, T. Kodama, L. J. El-Jaick and E. R. Hilf, Phys. Rev. **C15** (1976) 2032
33) C. Mahaux, Int. Conf. on physics of medium-light nuclei, ed., P. Blasi and R. A. Ricci (Florence, 1977)

34) H. S. Köhler, Nucl. Phys. **A162** (1971) 385; **A170** (1971) 88
35) T. Suzuki, Nucl. Phys. **A217** (1973) 182
36) S. Stringari, E. Lipparini, G. Orlandini, M. Traini and R. Leonardi, Nucl. Phys. **A309** (1978) 189
37) X. Campi and D. W. L. Sprung, Nucl. Phys. **A194** (1972) 401
38) G. E. Brown, The nucleon-nucleon interaction and the nuclear many-body problem, Nordita Lectures, 1978
39) A. B. Migdal, A. A. Lushnikov and D. F. Zaretsky, Nucl. Phys. **66** (1965) 193
40) O. Sjöberg, Ann. of Phys. **78** (1973) 39;
J. P. Blaizot, Thèse, Université de Paris 1977, and private communication;
D. Gogny and R. Padjen, Nucl. Phys. **A293** (1977) 365

NUCLEAR INCOMPRESSIBILITY :

FROM FINITE NUCLEI TO NUCLEAR MATTER

J. Treiner, H. Krivine, O. Bohigas

Division de Physique Théorique*, Institut de Physique Nucléaire,
F-91406 ORSAY Cedex

and

J. Martorell

Universidad Autónoma Madrid
Depto. Física Teórica C-XI
Madrid 34, Canto Blanco, Espagne

IPNO/TH 81-2

---

*Laboratoire associé au C.N.R.S.

ABSTRACT

The recent increase of experimental data concerning the Giant Monopole Resonance Energy E_M gives information on the incompressibility modulus of nuclear matter, provided one can extrapolate the incompressibility of a nucleus K_A, defined by $E_M = [\frac{\hbar^2}{m} \frac{K_A}{\langle r^2 \rangle}]^{1/2}$, to the infinite medium. We discuss the theoretical interpretation of the coefficients of an $A^{-1/3}$ -expansion of K_A by studying the asymptotic behaviour of two RPA sum rules (corresponding to the scaling and the constrained model), evaluated using self-consistent Thomas-Fermi calculations. We show that the scaling model is the most suitable one as it leads to a rapidly converging $A^{-1/3}$ -expansion of the corresponding incompressibility K_A^s, whereas this is not the case with the constrained model. Some semi-empirical relations between the coefficients of the expansion of K_A^s are established, which reduce to one the number of free-parameters in a best fit analysis of the experimental data. This reduction is essential due to the still limited number and accuracy of experimental data. We then show the compatibility of the data given by the various experimental groups with this parametrization and obtain a value of $K_{nm} = 220 \pm 20$ MeV, in good agreement with more microscopic analysis.

INTRODUCTION

It is known that the isoscalar Giant Monopole Resonance (GMR) is a compression mode which gives information on the incompressibility modulus K_{nm} of nuclear matter. However the extrapolation from finite nuclei to nuclear matter is not straightforward as surface (eventually higher order contributions), Coulomb and asymmetry effects significantly modify the restoring force from its nuclear matter value to its value K_A in a finite nucleus [1,2]. The problem is similar to the one of extracting nuclear matter parameters from the knowledge of nuclear binding energies (Liquid Droplet Model [3]). One major difference is however that in this later case more than one thousand experimental data are known, whereas in the former one only a couple of dozen of resonance energies E_M are at our disposal.

One indirect way to extrapolate to infinite nuclear matter has been used in the past few years : RPA calculations of the response function [4-7] (or RPA sum rules [1,8-12]) for a given monopole excitation operator are performed with phenomenological effective interactions and compared to the experimental resonance energies in a few nuclei. The ground state properties of nuclear matter and in particular the corresponding incompressibility K_{nm} are also calculated with the same interaction. In this approach neither the particular choice of the monopole excitation operator, as long as it gives rise to a collective state, nor the choice of the sum rules

are crucial, the strength function being concentrated in a narrow energy region and different collective operators giving similar resonance energies. Among the possible choices, one usually uses the operator $Q = \sum_{i=1}^{A} r_i^2$ because it is close to the, although poorly known, experimental excitation operator for inelastic hadron scattering. It is a very collective operator for finite nuclei and has a simple structure. In this way it has been shown that only interactions having an incompressibility modulus in nuclear matter $K_{nm} \simeq 220 \pm 30$ MeV do produce the experimental resonance energies [1,2,13].

An alternative extrapolation procedure can be attempted. Defining the incompressibility K_A of nucleus A from the position of its resonance energy E_M by

$$E_M = \left[\frac{\hbar^2}{m} \frac{K_A}{\langle r^2 \rangle} \right]^{1/2} \qquad (1.1)$$

where $\langle r^2 \rangle$ is the mean square radius, and using the fact that E_M is a slowly varying function of the mass number one writes an $A^{-1/3}$- expansion for K_A :

$$K_A = K_v + K_s A^{-1/3} + K_c A^{-2/3} + \left[K_{\delta,v} + K_{\delta,s} A^{-1/3} \right] \delta^2 + K_{coul} \frac{Z^2}{A^{4/3}} + \ldots \qquad (1.2)$$

where $\delta = \frac{N-Z}{A}$. One can then try to extract directly the different coefficients appearing in eq. (1.2) from experimental data. Provided that such an expansion is theoretically

justified, the comparison between this expansion and the corresponding one for the calculated incompressibility could give some information on more detailed features of the effective interaction than just K_{nm}.

The theoretical interpretation of the various coefficients entering in eq. (1.2) requires that K_A extracted from experiment can be identified to some definite average quantity that can be obtained from microscopic calculation. The sum rules provide a way of defining some mean energy which can be compared to the experimental data, in terms of the moments m_k of the strength function

$$m_k = \sum_n E_n^k |\langle n|Q|0\rangle|^2 \qquad (1.3)$$

where $|0\rangle$ is the ground state of the nucleus and E_n the excitation energy of state $|n\rangle$. Among the various mean energies $\tilde{E}_k$ that can be defined

$$\tilde{E}_k = \sqrt{\frac{m_k}{m_{k-2}}} \qquad (1.4)$$

$\tilde{E}_3$ and $\tilde{E}_1$ have been particularly used. If the strength function is distributed in a very narrow energy region, all the values $\tilde{E}_k$ are very close to each other and there is no ambiguity in the comparison with the experimental values. In that case the extrapolation given by (1.2) is in principle unambiguous : in particular K_v should be interpreted as the incompressibility

modulus of nuclear matter $K_{nm} = 9\rho_{nm}^2 \frac{d^2 \mathcal{E}/A}{d\rho_{nm}^2}$, where $\frac{\mathcal{E}}{A}$ is the energy per particle.

In a recent paper [14] (hereafter referred to as JJ) Jennings and Jackson have shown that the monopole strength function, although concentrated in real heavy nuclei, should spread out for bigger systems, so that one does not get the same asymptotic limit for the different incompressibilities K(k), defined by

$$\tilde{E}_k = \left[\frac{\hbar^2}{m} \frac{K(k)}{\langle r^2 \rangle} \right]^{1/2} \qquad (1.5)$$

Particular emphasis is put, in JJ's paper, on the linear inverse energy weighted sum rule which defines a "constrained incompressibility" $K_A^s (\equiv K(1))$ and on the cubic energy weighted sum rule (scaling model) which defines a "scaled compressibility" $K_A^s (\equiv K(3))$. JJ show that

$$K_{nm} = K_v^s = \frac{10}{7} K_v^c \qquad (1.6)$$

Consequently, if one calculates K_A from eq. (1.1) using the experimental peak, already the theoretical interpretation of the leading term K_v of the $A^{-1/3}$-expansion (1.2) is ambiguous. Furthermore, the peak energy cannot be identified neither with $\tilde{E}_1$ nor with $\tilde{E}_3$. Rather, one should extract $\tilde{E}_1$ or $\tilde{E}_3$ from the data , assuming for example a Gaussian shape for the strength function and using the experimental information

on the width of the resonance.

In the present work we analyze the problem of how to extrapolate from finite nuclei to an infinite medium within a more realistic framework -self-consistent Thomas Fermi calculations, hereafter labelled MTF [15]- than the sharp cut-off model of the nucleus used by JJ. The material of the paper is organized as follows : in section 2, after a brief sketch of the sum rule approach to the GMR, we show that the MTF method is a reliable tool to investigate the behaviour of K_A^s and K_A^c by comparing its prediction to RPA sum rule calculations. In section 3 are presented two detailed analysis of K_A^s and K_A^c for systems with mass number going from A = 16 up to A = 5000. It is emphasized that one can find some relations between the coefficients in the expansion (1.2). We recover the main result of JJ given by eq.(1.6) although the bending of K_A^c toward its asymptotic value $\frac{7}{10} K_{nm}$ is not seen below $A \simeq 500$ nucleus. It is shown that the $A^{-1/3}$ -expansion of K_A^c is very poorly convergent, in contrast to the case of K_A^s. Therefore in section 4, devoted to the extrapolation of experimental data, one uses the scaling model. Our conclusions are presented in section 5.

2.1 Sum-rule approach to the GMR

We summarize here some well known results and refer the reader to ref.[1,8-12] for a complete discussion of the method.

The linear inverse energy weighted sum-rule (which gives the static monopole polarizability)

$$m_{-1} = \sum_n \frac{1}{E_n} \left| \langle n | \sum_{i=1}^{A} r_i^2 | 0 \rangle \right|^2 \qquad (2.1)$$

can be calculated as the response of the system to an external fie $-\lambda r^2$ constraining the root mean square radius. Let H be the Hamiltonian density of the system. The solution of the Euler equation corresponding to the constrained nucleus gives the energy of the system as a function of λ

$$\mathcal{E}(\lambda) = \int H[\rho_\lambda(r)]\, d\vec{r} \qquad (2.2)$$

and one has

$$m_{-1} = \frac{1}{2} \left. \frac{d^2 \mathcal{E}(\lambda)}{d\lambda^2} \right|_{\lambda=0} \qquad (2.3)$$

Perturbation theory to first order shows also that

$$m_{-1} = \frac{1}{2} A \left. \frac{d \langle r^2(\lambda) \rangle}{d\lambda} \right|_{\lambda=0} \qquad (2.4)$$

where $\langle r^2(\lambda) \rangle$ is the mean square radius of the constrained nucleus.

The linear energy weighted sum-rule is an almost model independent quantity

$$m_1 = \sum_n E_n \left| \langle n | \sum_{i=1}^{A} r_i^2 | 0 \rangle \right|^2 = 2A \frac{\hbar^2}{m} \langle r^2 \rangle \qquad (2.5)$$

Combining this result with (1.5) and (2.4) one gets

$$\tilde{E}_1 = \left[\frac{\hbar^2}{m} \frac{K_A^c}{\langle r^2 \rangle} \right]^{1/2} \qquad (2.6.a)$$

and

$$K_A^c = 4 \frac{\langle r^2 \rangle^2}{\frac{d \langle r^2 \rangle}{d\lambda}} \qquad (2.6.b)$$

The cubic energy weighted sum-rule can be obtained from a scaling on the equilibrium wave functions[9] (or densities in the case of Thomas-Fermi calculations)

The change in the density is given by

$$\rho(r) \longrightarrow \alpha^3 \rho(\alpha r) = \rho(r) + (\alpha - 1)\left(3\rho(r) + r\,\rho'(r)\right) + \dots \qquad (2.7)$$

then

$$m_3 = \sum_n E_n^3 \left| \langle n | \sum_{i=1}^{A} r_i^2 | 0 \rangle \right|^2 = \frac{1}{2} \left(\frac{2\hbar^2}{m} \right)^2 \left. \frac{d^2 \mathcal{E}(\alpha)}{d\alpha^2} \right|_{\alpha=1} \qquad (2.8)$$

where

$$\mathcal{E}(\alpha) = \int H\left[\alpha^3 \rho(\alpha r)\right] d\vec{r} \qquad (2.9)$$

Combining (1.5) and (2.8) one obtains for $\tilde{E}_3$ and K_A^S the following expressions

$$\tilde{E}_3 = \left[\frac{\hbar^2}{m} \frac{K_A^S}{\langle r^2 \rangle} \right]^{1/2} \qquad (2.10.a)$$

$$K_A^S = \frac{1}{2} \left. \frac{d^2(\xi(\alpha)/A)}{d\alpha^2} \right|_{\alpha=1} \qquad (2.10.b)$$

It follows from the properties of the m_k's that

$$K_A^C \leq K_A^S$$

In order to discuss transition densities it is useful to generalize eq.(1.3) by introducing more general sum-rules

$$m_k(A,B) = \frac{1}{2} \sum_n E_n^k \left\{ \langle 0|A|n\rangle\langle n|B|0\rangle + \langle 0|B|n\rangle\langle n|A|0\rangle \right\} \qquad (2.11)$$

Special cases that will be discussed are

i) A = B = Q (= monopole operator) and one recovers eq.(1.3) ($m_k \equiv m_k(Q,Q)$)

ii) A = Q, B = $\hat{\rho} = \sum_{i=1}^{A} \delta(r-r_i)$ (one-body density)

The two following averaged transition densities [31] will be discussed

$$\delta\rho_{+1}(r) = \frac{m_1(\varphi,\hat{\rho})}{m_1(\varphi,\varphi)} = \frac{1}{2\langle r^2 \rangle} \left(3\rho(r) + r\rho'(r) \right) \qquad (2.12)$$

which corresponds to the scaling deformation and

$$\delta\rho_{-1}(r) = \frac{m_{-1}(\varphi,\hat{\rho})}{m_{-1}(\varphi,\varphi)} = \frac{\frac{1}{2} \left. \frac{d\rho_\lambda(r)}{d\lambda} \right|_{\lambda=0}}{\frac{1}{2} \left. \frac{d\langle r^2(\lambda)\rangle}{d\lambda} \right|_{\lambda=0}} \qquad (2.13)$$

which corresponds to the constrained case. The normalization taken in (2.12) and (2.13) insures that when a single state exhausts the sum-rule, then $\delta\rho_{+1}(r) \equiv \delta\rho_{-1}(r)$.

It should be noted that eqs. (2.3), (2.5), (2.8), (2.12) and (2.13) hold when all quantities are exact ones. However, it has been shown that they also hold when the ground state expectation values are HF ones and the sum rules are RPA sum rules.

2.2 MTF calculations with Skyrme like forces

The MTF estimates of m_1 and m_3 are expected to be accurate as long as the MTF equilibrium densities compare satisfactorily with HF ones. The calculation of m_{-1} requires to put a constraint on the m.s. radius . As will be seen in the next section, the density is then no longer constant inside the nucleus, there is some distortion of the Fermi surface and a Thomas-Fermi approximation (where one assumes a spherical Fermi surface) is less accurate. We expect this effect to be small in a compression mode and will neglect it in the following.

We shall discuss particularly calculations made using S-III [16] and SkM [15] forces. This last force is a Skyrme type force in which the density dependent component has been modified in two ways :

i) the power σ of the density dependent force has been chosen equal to $\frac{1}{6}$ instead of 1 in usual Skyrme forces in order to lower the value of K_{nm} from $\sim$ 300 MeV down to 216 MeV.

ii) the spin exchange coefficient x_3 in the density dependent component has been set to zero in order to get a good position of the Giant Dipole Resonance.

We show in table 1 the main characteristics of these two interactions in nuclear matter. We recall here the expressions for the energy density, the incompressibility modulus K_{nm} and the symmetry energy a_δ at saturation point ρ_{nm} in symmetric nuclear matter

$$H = \frac{\hbar^2}{2m}\tau + \frac{t_0}{2}\left[(1+\frac{x_0}{2})\rho^2 - (x_0+\frac{1}{2})(\rho_n^2+\rho_p^2)\right]$$
$$+ \frac{t_3}{12}\rho^\sigma\left[(1+\frac{x_3}{2})\rho^2 - (x_3+\frac{1}{2})(\rho_n^2+\rho_p^2)\right]$$
$$+ \frac{t_1+t_2}{4}\rho\tau + \frac{1}{8}(t_2-t_1)(\rho_n\tau_n+\rho_p\tau_p)$$
$$+ \frac{3}{32}(t_1-t_2)(\nabla\rho_n^2+\nabla\rho_p^2) + \frac{1}{8}(3t_1-t_2)\nabla\rho_n\nabla\rho_p \qquad (2.14.$$

$$\rho = \rho_n+\rho_p \quad , \quad \tau = \tau_n+\tau_p$$

$$K_{nm} = -\frac{6}{5}T_F + \frac{9}{16}\sigma(1+\sigma)t_3\rho_{nm}^{1+\sigma} + \frac{3}{8}(3t_1+5t_2)\rho_{nm}k_F^2 \qquad (2.1$$

$$a_\delta = \frac{1}{3}T_F - \frac{1}{4}t_0(x_0+\frac{1}{2})\rho - \frac{t_3}{24}(x_3+\frac{1}{2})\rho^{1+\sigma} + \frac{t_2}{6}\rho k_F^2 \qquad (2.14$$

where

$$T_F = \frac{\hbar^2}{2m}k_F^2$$

$$\rho_{nm} = \frac{2}{3\pi^2}k_F^3$$

We use for the kinetic energy densities the MTF functional [26]

$$\tau_q = \alpha(A_q)\,\rho_q^{5/3} + \beta_q \frac{(\nabla\rho_q)^2}{\rho_q} \qquad (2.15)$$

where $A_n(A_p)$ is the number of neutrons N (protons Z). This functional has been shown to give surface properties in good agreement with corresponding Hartree-Fock results, a feature most desirable in the present study.

The "scaled" incompressibility K_A^s can be expressed in terms of equilibrium quantities; one gets

$$A.K_A^s = 2E_\tau + 6E_\delta + 20E_{fin} + 3(1+\sigma)(2+3\sigma)E_\rho \qquad (2.16)$$

where E_τ, E_δ, E_{fin} and E_ρ represent respectively the contributions of the kinetic energy, the term in t_0, the term in t_1 and t_2, and the term in the t_3 to the total energy $\mathcal{E}$ at equilibrium.

The calculation of K_A^c via m_{-1} requires great care, as the derivatives in eq.(2.3) and (2.4) have to be calculated numerically (we have used eq. (2.4) instead of eq. (2.3) as m_{-1} appears in the former as a first derivative with respect to the intensity of the constraint instead of a second derivation in the later). The accuracy of the convergence of the

self-consistent calculations must be of the order of 10^{-6} on the r.m.s. radius and on the energy in order to have an accuracy on m_{-1} of the order of 1%.

The comparison between the MTF results for the monopole energies and the RPA sum rules calculations, using S-III interaction is presented in table 2 and figs.1 and 2. As can be seen, an overall good agreement is achieved. Also given are the results obtained with SkM interaction. Table 2 shows that the MTF values of the energies are of the order of 5% lower than the corresponding RPA values. Consequently the MTF incompressibilities extracted from eq.(1.1) will be 10% too low. However let us notice that the differences between K_A^C and K_A^S -which is quite significant in our analysis- is reproduced with much better accuracy;we see in particular that when one goes from light to heavy nuclei (see fig.2) the difference between K_A^S and K_A^C first decreases and then is almost constant in medium and heavy nuclei as in RPA calculations. As already noticed [13],for a given interaction the computed values of K_A are almost independent of A in medium and heavy nuclei, due to asymmetry and Coulomb effects which will be analyzed in detail in the next section. In fig.1 are plotted the MTF and RPA transition densities $\delta\rho_{J=1}$. The small discrepancies can be traced back to differences in the equilibrium densities ; the mean square radii are slightly smaller in HF calculations due to i) the center of mass correction which affects light nuclei ii) the spin orbit force which affects heavy nuclei (the spin orbit force is not taken into a account in the MTF calculations presented here).

The use of the semi classical expansion up to h^2 for the kinetic energy density (Improved Fermi - ITF [32]) would compare significatively worse with the RPA transtion densities. It is due to the fact that the shapes of the equilibrium density are not so accurately reproduced by ITF.

When comparing integrated results, it appears that RPA results for $\tilde{E}_3$ are surprisingly well reproducted by ITF (within 1.3%) ; but it is no more the case for $\tilde{E}_1$ whose values are systematically higher (13%).

That is the reason to prefer MTF approximation to the ITF. In what follows the self consistent calculations presented are obtained in the MTF approximation.

3. Results and discussion

3.1. Asymptotic limits and transition densities

We show on fig. 3 the results of self-consistent MTF calculations of K_A^S and K_A^C for systems with N = Z and A = 16, 40, 90, 120, 208, 350, 500 and 5000 nucleons using S-III and SkM forces without the Coulomb interaction.

The values of K_A^S plotted as a function of $A^{-1/3}$ lie almost on a straight line with K_{nm} as limit for an infinite medium. In contrast, the same plot for K_A^C shows a linear behaviour only up to $A \simeq 500$. Afterwards the curve bends towards its asymptotic limit. Numerically, by performing a best fit to the calculated values from A = 90 to A = 5000 with a formula of the type (1.2) containing surface and curvature terms

$$K_A^C = K_v^C + K_s^C A^{-1/3} + K_c^C A^{-2/3} , \qquad (3.1)$$

the theoretical value $K_v^C = \frac{7}{10} K_{nm}$ is found for both interactions with an accuracy of $\sim$ 3%.

We show on fig. 4 the transition densities for $^{40}_{20}X$, $^{90}_{45}X$, $^{208}_{104}X$ and on fig. 5 for $^{5000}_{2500}X$. On sees that although the shapes look very similar in the physical region they differ quite substantially in the asymptotic region. A simple way to study this behaviour is to calculate the quantity $\Delta\rho^2 = \int (\delta\rho_1 - \delta\rho_{-1})^2 d\vec{r}$. One finds that $\Delta\rho$ decreases from light nuclei to heavy nuclei and increases again in very large systems. It is therefore not surprising that $K_A^S - K_A^C$ shows the same tendency.

Figs. 5 and 6 also show that the transition density in the scaling model $\delta\rho_{+1}$ is constant inside the nucleus while in the constrained one, $\delta\rho_{-1}$, it has a parabolic behaviour, (up to 14fm in $^{5000}_{2500}X$) in agreement with eq.(A-14) of Appendix A. Thus the change in the density is greater in the interior than at the surface, where most of the nucleons stand. One thus recovers that $K_A^c < K_A^s$.

Before turning to a more detailed discussion of the different contributions to K_A^s and K_A^c, let us recall that the bending of K_A^c is seen only for $A \gtrsim 500$. In the physical region, $A < 250$, surface, curvature and higher order terms combine in such a way as to give a linear behaviour of K_A^c as a function of $A^{-1/3}$. Surprisingly, if one extrapolates -with both interactions that have been considered- the linear part of the curve towards the region of large A, one gets instead of $\frac{7}{10} K_{nm}$, a value close to K_{nm}. Wether this is a numerical accident or has a deeper origin remains to be seen.

3.2. "Constrained" incompressibility K_A^c

3.2.1 Surface and higher order terms

Using a sharp cut-off model for the nuclear density for systems with N=Z and no Coulomb interaction, JJ obtain the following expression for the constrained incompressibility (eq.(8.12) of ref.[14]) :

$$K_A^c = \frac{7}{10} K_{nm} + \frac{189}{50} a_s \left[1 + \frac{10}{K_{nm}} \rho_{nm}^2 \frac{d^3 H}{d\rho_{nm}^3} \right] A^{-1/3} \qquad (3.2)$$

where a_s is the surface energy coefficient of the mass formula. A slightly different derivation of (3.2), using eq. (2.4) instead of eq. (2.3), is given in Appendix A. The surface contribution to K_A^c is found to be positive. Indeed, the term

$$\rho_{nm}^2 \frac{d^3H}{d\rho_{nm}^3} = \frac{\rho_{nm}}{9}\left[\frac{dK_{nm}}{d\rho_{nm}} - \frac{K_{nm}}{\rho_{nm}}\right] \qquad (3.3)$$

is positive, due to the fact that K_{nm} is a rapidly increasing function of ρ. We show in Appendix C that this term can be accurately related to the equilibrium quantities $\left(\frac{\mathcal{E}}{A}\right)_{nm}$, ρ_{nm} and K_{nm} for a very large variety of forces. For S-III and SkM forces, using eq. (3.2) one finds respectively (see table 3), K_s^c = 362 MeV and 272 MeV. The corresponding values obtained through a best fit analysis to our calculated incompressibilities in the region $120 \lesssim A \lesssim 5000$ fixing the volume term to $\frac{7}{10} K_{nm}$ are 582 MeV and 470 MeV. The discrepancies with the values obtained through eq. (3.2) might be due to the sharp cut-off model used to derive this equation. That this may be the case is also indicated by the fact that if one uses $K_v^c = 7/10\ K_{nm}$

and for K_s^c the values given by JJ's estimate, it is impossible to obtain a good fit to the calculated values of K_A^c even when one allows for terms in $A^{-2/3}$, A^{-1} and $A^{-4/3}$.

Notice that K_s^c is given by the slope of the curve K_A^c as a function of $A^{-1/3}$ in the asymptotic region. As already noticed, in the physical region (see fig. 3), the slope is negative. This is why in ref.[2,17], the authors obtain a negative value of the surface term when fitting with an $A^{-1/3}$-expansion the RPA sum rules results corresponding to the constrained model. The change of the sign is due to curvature and higher order terms which are therefore very important. The importance of an A^{-1}-term in the physical region can be seen from the following argument. In the region $90 \leq A \leq 208$, $A^{-1/3}$ varies from 0.22 to 0.17. The sum of surface plus curvature terms is then equivalent to a renormalized surface term $\tilde{K}_s^c = K_s^c + 0.2\, K_c^c$. Using the values of K_c^c given in table 3, one obtains $\tilde{K}_s^c \simeq 0$. That the slope of K_A^c in the physical region is negative is thus due to the A^{-1}-term. The conclusion of the present analysis contradicts the estimate of the curvature term by JJ ($K_c^c = -597$ MeV to be compared to -2920 Mev, see table 3) based only on a calculation of ^{208}Pb.

That this evaluation is clearly wrong can be seen if one uses JJ's estimate of the coefficients of the $A^{-1/3}$ -expansion in other nucle for example one obtains K_A^C = 279 MeV in ^{40}Ca instead of 186 MeV from RPA sum rules and 262 MeV in ^{90}Zr instead of 217 MeV from RPA sum rules [2]. The reason of the poor convergence of K_A^C will be further discussed at the end of this section.

We shall now analyze the asymmetry and the Coulomb contributions to K_A^C. In order to obtain these quantities numerically, we proceed as follows :

i) the asymmetry coefficient is determined by comparing K_A^C in systems with A = 90, 120, 208 and N=Z to the corresponding values in $^{208}_{82}Pb$, $^{120}_{50}Sn$, $^{90}_{40}Zr$ -all calculations being made without the Coulomb interaction.

ii) the Coulomb coefficient is determined by comparing K_A^C in systems with N = Z and A from 16 to 208 with and without the Coulomb interaction. The same procedure has been followed when dealing with the scaling case (section 3.3).

3.2.2 Asymmetry contribution

We write the asymmetry contribution to K_A^c as :

$$K_\delta^c \delta^2 = \left(K_{\delta,v}^c + K_{\delta,s}^c A^{-1/3} \right) \delta^2$$

The volume term $K_{\delta,v}^c$ given in ref.[14], is

$$K_{\delta,v}^c = \frac{7}{10} \left[9\rho_{nm}^2 \frac{d^2 a_\delta}{d\rho_{nm}^2} + 3L - \frac{27L}{K_{nm}} \rho_{nm}^2 \frac{d^3 H}{d\rho_{nm}^3} \right] \qquad (3.4.a)$$

where

$$L = 3\rho_{nm} \frac{da_\delta}{d\rho_{nm}} \quad ; \qquad (3.4.b)$$

a_δ is the volume symmetry energy coefficient in the mass formula. The first term in the bracket in eq.(3.4a) is often denoted by K_{sym}.

The values obtained with formula (3.4.a) for K_v^c with interaction S-III and SkM are respectively (see table 3) -319 MeV and -251 MeV. We have plotted on fig. 6 the calculated values of the total asymmetry contributions K_δ^c to K_A^c as a function of $A^{-1/3}$: one can see that there is an important surface term $K_{\delta,s}^c$ = -3537 MeV with S-III and -1340 MeV with SkM. Its contribution to K_A^c is of the same order of magnitude as the volume term $K_{\delta,v}^c$ indicating again the poor convergence of the $A^{-1/3}$ -expansion of K_A^c.

3.2.3. Coulomb contribution .

The expression given by JJ

$$K_{coul}^c \frac{Z^2}{A^{4/3}} = -\frac{3}{5r_0} \frac{Z^2 e^2}{A^{4/3}} \left[1 + \frac{63}{2} \frac{\rho_{nm}^2}{K_{nm}} \frac{d^3 H}{d\rho_{nm}^3} \right] \qquad (3.5)$$

where r_0 is the nuclear radius parameter ($r_0 \sim 1.18$fm), is obtained through the approximation that both neutrons and protons have a charge $e\frac{Z}{A}$. The decrease of the central density due to Coulomb interaction is then overestimated , as one neglects the effect of the symmetry energy, which opposes this tendency.

We have calculated numerically the difference ΔK_A^c between the constrained incompressibilities in nucleus A obtained with and without the Coulomb interaction . We find that the quantity $(A^{4/3}/Z^2)\,\Delta K_A^c$ varies, with S-III force, from -8.4 MeV to -3.8 MeV from ^{16}O to ^{208}Pb whereas with SkM, it varies from -4.8 MeV to -3.7 MeV. The values given by eq.(3.5) are respectively -8.7 MeV and -6.9 MeV. Therefore eq.(3.5) does not give the correct A -dependence of the Coulomb contribution ; higher order terms (i.e. surface corrections) as well as symmetry energy effects are not included in (3.5) and cannot be neglected.

Our conclusion is that the simple sharp cut-off model of the nucleus fails in predicting the values of the coefficients of the $A^{-1/3}$ -expansion beyond the volume term : the surface term is underestimated by a factor of 2, the surface asymmetry term cannot be evaluated in a simple way in this model a has been shown to be important and the Coulomb term seems structurally inadequate.

3.3 Scaling model K_A^s

3.3.1 Surface and curvature terms .

It has been already noted (see fig. 3) that in the scaling case the curvature term is small. A systematic calculation of the different terms of the $A^{-1/3}$ -expansion can be obtained in the following way. Formula (2.16) expresses K_A^s as a functional of the density $\rho(r)$ and its derivative. If one assumes a Fermi shape for $\rho(r)$

$$\rho(r) = \frac{\rho_0}{1+\exp\frac{r-R}{a}} \qquad (3.6)$$

the expression of K_A^s involves the integrals

$$I_{\nu,\mu} = \int_0^\infty \frac{r^\mu dr}{(1+\exp\frac{r-R}{a})^\nu} \qquad (3.7)$$

with $\mu = 2$ and where the ν's have integer and non integer values. By expanding $I_{\nu,\mu}$ in powers of $\frac{a}{R}$, one can calculate the volume, surface, curvature ... contributions to K_A^s , using the very good approximation $\frac{a}{R} = \frac{a}{r_0} A^{-1/3}$ with a and r_0 constants. The $\frac{a}{R}$-expansion of $I_{1,2}$ is calculated using Sommerfeld's lemma (see for example ref. [18] p.389).

The $\frac{a}{R}$ -expansion of $I_{\nu,\mu}$ for integer values of ν can then be deduced using the recurrence relations of Appendix B. For non integer values of ν, the series defining the coefficients of the $\frac{a}{R}$ -expansion (see Appendix B) converge for $\nu \leq 1$ only, and can be calculated numerically. For non-integer values of $\nu > 1$, one uses the recurrence relations.

It is shown in Appendix B that the $I_{\nu,2}$'s have a rapidly converging $\frac{a}{R}$ expansion : the three first coefficients are of the same order of magnitude. Thus clearly the contribution of the curvature term to K_A^s is small . However concerning the calculation of K_s^s (or K_s^c) using the $\frac{a}{R}$ expansion of the $I_{\nu,\mu}$'s, let us make the following remarks on additional sources of A-dependence : in eq.(3.6), due to the surface tension, ρ_0 is greater than ρ_{nm}. Consequently R has not just an $A^{1/3}$ dependence and a is an increasing function of A. Moreover the MTF functional introduces a specific A- dependence in the kinetic energy term. These questions deserve further study and will be discussed elsewhere.

One can see in table 3 the results concerning the surface and curvature coefficients K_s^s and K_c^s obtained by a best fit to our calculated values of K_A^s. Using S-III, the curvature coefficient (275 MeV) gives a contribution to K_A^s of 7.8 MeV in ^{208}Pb(6%) and 29.1 MeV in ^{40}Ca (19%).

This shows that the curvature contribution, although small, is not completely negligible. For nuclei $90 \leq A \leq 208$ it can be included by taking an average value for $A^{-1/3}$ of the order of 0.2 and defining a renormalized surface coefficient $K_s^s(\text{renorm}) = K_s^s + 0.2\, K_c^s$. Its value is -461 MeV with S-III and -237 MeV with SkM, i.e. 10 to 15% lower than the corresponding values of K_s^s. However one should keep in mind that the MTF calculations systematically underestimate (10%) the values of K_A^s compared to RPA calculations (see section 2.2). Together with the above renormalization, one obtains finally an effective surface coefficient $\tilde{K}_s^s$ close to $-K_{nm}$ for both interactions.It is this last estimate which will be used from now on.A semi-empirical linear relation between K_s^s and K_{nm} has been discussed in ref.[2]. We can use the expansion of the $I_{\nu,\mu}$'s to confirm this analysis in the following way. In eq.(2.16) the contribution of $20E_{fin}$ is found negligible (less than 10%). Taking into account the remarks mentioned above, one can show that the three other terms E_τ , E_δ and E_ρ can be written

$$E_i = E_i(\rho_{nm}) \left[1 - \xi_i A^{-1/3} + \dots \right] \qquad (3.9)$$

where i stands for τ, δ and ρ. One finds that the ξ_i's depend weakly on the interaction and lie all around a value 1.3 (with an accuracy of 15%). So we expect $K_s^s \simeq -1.3\, K_{nm}$,

which is in good agreement with the values of K_s^s given in table 3. Taking again into account the renormalization due to the curvature term and the underestimate of the MTF approximation, one recovers $\tilde{K}_s^s \simeq -K_{nm}$.

3.3.2 Asymmetry term K_δ^s

The volume term can be estimated by [2]

$$K_{\delta,v}^s = \frac{10}{7} K_{\delta,v}^c = 9\rho_{nm}^2 \frac{d^2 a_\delta}{d\rho_{nm}^2} + 3L - 27 \frac{L}{K_{nm}} \rho_{nm}^2 \frac{d^3 H}{d\rho_{nm}^3} \qquad (3.10)$$

(see eq.(3.4.a). On fig. 6 are reproduced the computed values of K_δ^s plotted as a function of $A^{-1/3}$. By using

$$K_\delta^s = K_{\delta,v}^s + K_{\delta,s}^s A^{-1/3} \qquad (3.11)$$

one can extract from the computed values of $K_\delta^s \delta^2$ the values of the coefficients $K_{\delta,v}^s$ and $K_{\delta,s}^s$. The estimation given by eq.(3.10) is found excellent. Furthermore one can see that the surface contribution to the asymmetry term is small (20% of the volume asymmetry term in ^{208}Pb) in contrast to the constrained case, in which volume and surface asymmetry terms have been found to be of the same order of magnitude (see section 3.2). As has been done for the surface coefficient one can define an effective volume asymmetry coefficient $\tilde{K}_{\delta,v}^s$ by taking an average value for $A^{-1/3}$ of 0.2 in the physical region, which renormalizes the volume coefficient

by $\sim$ 80 MeV (see table 3). In table 4 are reproduced values of $K^S_{\delta,v}$ obtained through eq.(3.10) for different forces. Despite the wild variation of the several terms contributing to $K^S_{\delta,v}$, it appears that the final result is not too interaction dependent (-350 MeV to -450 MeV). Notice also that for both interactions considered the same value of $K^S_{\delta,s}$ is obtained [1].

3.3.3. Coulomb term K^S_{coul}

The quantity $\Delta K^S_A\left(\frac{A^{4/3}}{Z^2}\right)$ is deduced from the comparison of the two values of K^S_A obtained with and without the Coulomb interaction for nuclei in the range $16 \lesssim A \lesssim 208$. For a given interaction, it is found, to wihtin 10%, to be independent of the nucleus and in good agreement with the formula given by Blaizot [2]

$$K^S_{coul} = \frac{3}{5}\frac{e^2}{r_0}\frac{Z^2}{A^{4/3}}\left[1 - \frac{27}{K_{nm}}\rho^2_{nm}\frac{d^3H}{d\rho^3_{nm}}\right] \qquad (3.12)$$

It is shown in Appendix C that the quantity $\rho^2_{nm}\frac{d^3H}{d\rho^3_{nm}}$ can be related, in an approximate but quite accurate way, to K_{nm}. The following relation

$$\rho^2_{nm}\frac{d^3H}{d\rho^3_{nm}} \simeq \frac{K_{nm}}{2} - 45 \quad \text{(in MeV)} \qquad (3.13)$$

(1) In ref.[17], the same value has been taken for $K^S_{\delta,v}$ in the constrained and in the scaling model (see table 8 of ref.[17]). This explains why our values of $K^S_{\delta,v}$ agree in the scaling model and differ considerably (they even do not have the same sign) in the constrained model. An analogous remark holds for the coefficient K^S_{coul}.

where the constants entering (3.13) are determined by the Fermi momentum and the saturation energy, is found to hold for a wide range of interactions ; one can see in table 5 that eq.(3.13) gives the correct value within 10% for a set of effective or realistic interactions having $k_F = (1.3 \pm 0.3)$ fm and $\left(\frac{\xi}{A}\right)_{nm} = (-16 \pm 1)$ MeV. The Coulomb term can thus be written as :

$$K^s_{coul} \frac{Z^2}{A^{4/3}} = -\frac{3}{5}\frac{e^2}{r_0}\frac{Z^2}{A^{4/3}}\left[12.5 - \frac{1215}{K_{nm}}\right] \qquad (3.14)$$

The results of subsection 3.3 can be summed-up in the following expression for K^s_A :

$$K^s_A = K_{nm} + \alpha K_{nm} A^{-1/3} + K_\delta \left(\frac{N-Z}{A}\right)^2 - \frac{3}{5}\frac{e^2}{r_0}\left(12.5 - \frac{1215}{K_{nm}}\right)\frac{Z^2}{A^{4/3}} \qquad (3.15)$$

where $\alpha \simeq -1$. The comparison between eq.(3.15) and the RPA sum-rule values calculated using interactions S-III, S-IV and Ska (no such calculations have been made with SkM) can be seen in table 6. The close agreement observed ($\sim 1\%$) gives some confidence in eq.(3.15) . We also show in fig. 7 the various contributions to K^s_A as functions of mass number A, calculated using values of the coefficients close to the SkM ones : $\alpha = -1$, $K_\delta = -300$ MeV, $r_0 = 1.18$fm and $K_{nm} = 216$ MeV.

3.4. On the convergence of the $A^{-1/3}$ -expansions

For the discussion that follows it is appropriate to use the expression of K_A obtained in a fluid dynamical approach [15].

The (radial) velocity field u(r) corresponding to the transition density $\delta\rho(r)$ can be obtained by integrating the continuity equation :

$$u(r) = -\frac{1}{r^2\rho(r)}\int_0^r t^2\,\delta\rho(t)\,dt \qquad (3.16)$$

The resonance energy (eq.(1.1)) appears as the ratio of the restoring force to the mass parameter ; if one neglects, for the sake of simplicity in the present discussion, the gradient terms in the functional, one has

$$\hbar\omega = \left[\frac{\hbar^2}{m}\frac{K_A}{\langle r^2\rangle}\right]^{1/2} = \left[\frac{\hbar^2}{m}\frac{\int \frac{\delta^2 H}{\delta\rho^2}(\delta\rho)^2 d\vec{r}}{\int \rho u^2 d\vec{r}}\right]^{1/2} \qquad (3.17)$$

In the scaling as well as in the constrained model, the transition density $\delta\rho$ is a functional of the density $\rho(r)$ and its derivatives. Thus, by use of eq.(3.16), one sees that eq.(3.17) expresses K_A as a functional of $\rho(r)$, $\rho'(r)$...which makes easy the discussion of the a/R-expansion (see section 3.3.1).

In the scaling model, one has

$$\delta\rho_{\pm 1}(r) \sim 3\rho(r) + r\rho'(r)$$
$$u(r) \sim r \qquad (3.18)$$

so that

$$K_A^S = \frac{4\pi}{A}\int \frac{\delta^2 H}{\delta\rho^2}(\delta\rho)^2 r^2 dr \qquad (3.19)$$

and one recovers that only $I_{\nu,\mu}$ with $\mu = 2$ appear in K_A^S.

In the constrained case, the transition density has a parabolic form inside the nucleus (see Appendix A)

$$\delta\rho_{-1}(r) \sim r^2 - R^2 \qquad (3.20)$$

and eq.(3.16) gives

$$u(r) \sim -\frac{r^3}{5} + \frac{R^2 r}{3} \qquad (3.21)$$

Then in eq.(3.17), the numerator involves the integrals $I_{\nu,\mu}$'s with $\mu = 6,4,2$ and the denominator, $I_{\nu,\mu}$'s with $\mu = 8,6,4,2$. It is shown in Appendix B that the greater the value of μ , the

slower the convergence of the a/R-expansion ; this means that the expansion of K_A^S will converge much faster than the expansion of K_A^C. Let us illustrate this in a particular case ; $I_{\nu,\mu}$ can be written as

$$I_{\nu,\mu} = \frac{R^{\mu+1}}{\mu+1}\left[1 + \eta^{(0)}_{\nu,\mu}(\mu+1)\frac{a}{R} + \eta^{(1)}_{\nu,\mu}(\mu+1)\frac{a^2}{R^2} + \ldots\right] \qquad (3.22)$$

For example, $\eta^{(0)}_{\frac{5}{3},2} = -0.75898$ and $\eta^{(1)}_{\frac{5}{3},2} = 3.03486$, so that

$$I_{\frac{5}{3},2} = \frac{R^3}{3}\left(1 - 2.28\,\frac{a}{R} + 9.10\left(\frac{a}{R}\right)^2 + \ldots\right) \qquad (3.23.a)$$

$$I_{\frac{5}{3},8} = \frac{R^9}{9}\left(1 - 6.83\,\frac{a}{R} + 109.25\left(\frac{a}{R}\right)^2 + \ldots\right) \qquad (3.23.b)$$

Taking some typical values a = 0.5 fm and R = 6 fm, one finds that the surface term in $I_{5/3,2}$ is 19% of the volume term and the curvature term is 6% whereas in $I_{5/3,8}$, the corresponding quantities become significantly greater, i.e. 57% and 76% . The system for which one has a ratio of surface to volume terms around 20% in $I_{5/3,8}$ has $R \simeq 17$ fm, i.e. $A \simeq 3000$ nucleons. This corresponds to what one sees on figs. 3.

From a more general point of view, the $A^{-1/3}$- expansi of the energy of a leptodermous system [19] is based on the fact that, if the density has the saturating property and if the energy is a functional of the density, then one can separate volume, surface and higher order effects in an expansion in powers of the ratio of the surface thickness to the radius

of the system. The same argument holds also for any physical quantity as long as it is a functional of the density. One could say that the system under constraint on $\langle r^2 \rangle$ looses partially the saturating property, because of the parabolic decrease of the density in the center. Although this would not alter the convergence of the expansion of the total energy as long as the constraint can be considered a small perturbation, it is seen to be particularly crucial if one is interested in the second derivative of the total energy, as it is the case when one is considering the compressibility K_A^c. Had we used the operator $j_o(qr)$, for some value of q [29,30] instead of r^2, the same argument would have shown that a strong curvature term is also present in the constrained model, due to the fact that in that case the transition density in the interior goes like $j_o(qr)$. It is shown in Appendix D of JJ's paper that in the scaling model using $j_o(qr)$, the asymptotic limit of the compressibility involves both K_{nm} and the Fermi energy ; thus here also a curvature term must be present.

Our conclusion is that one should use the scaling model rather than the constrained one when analyzing the experimental data in order to extract information on surface, asymmetry and Coulomb effects. Indeed we have seen that K_A^s shows a monotonous behaviour from light to heavy systems which is a desirable feature in the extrapolation. JJ have argued in their paper, noticing that in medium and heavy nuclei K_A^c is nearly constant and close to its asymptotic value, that one should use the constrained model. However

we have seen that this is just a remarkable numerical accident hiding the fact that K_A^C shows strong curvature effects which cannot be distinguished from surface ones in the physical region. Surprisingly, surface, asymmetry and Coulomb terms add up in such a way in the scaling model that one also has, in medium and heavy nuclei, $K_A^S \simeq 7/10\ K_{nm}$. This can be seen if one uses the relation obtained in ref.[1] with effective forces

$$K_A^S = K_{nm} - 63(\sigma + 1) \qquad \text{(in MeV)} \qquad (3.24)$$

where σ is the power of the density dependent component of the interaction. With S-III, $\sigma = 1$ and one gets $K_A^S/K_{nm} = 0.65$; with SkM, $\sigma = 1/6$ and $K_A^S/K_{nm} = 0.66$. It has already been noted in ref.[15] that the same kind of numerical accident happens in the liquid drop formula for the GMR energy [20]

$$E = \left[\frac{\hbar^2}{m} \frac{K_{nm}}{\langle r^2 \rangle} \frac{\pi^2}{15} \right]^{1/2} \qquad (3.25)$$

It so happens that $\frac{\pi^2}{15} \sim 1 - \frac{63(\sigma+1)}{K_{nm}} \simeq \frac{7}{10}$, so that if one wants to estimate K_{nm} only, any model (scaling, constrained, liquid drop) will give roughly the same value when compared to experiment, although the physics is different in the three approaches.

4. Analysis of experimental data.

4.1. K_A^S from the GMR.

Most of the information on the GMR comes from inelastic hadron scattering (p,d,^{3}He,α) with projectile energies of the order of 100 MeV. In table 7 are reproduced the results of the different analysis presently available. The four sets of data are roughly consistent, although when examined in detail, they show discrepancies (for instance for ^{120}Sn, the peak energy covers a range from 14.8 to 16.8 MeV). When comparing the theoretical predictions, we have excluded from our analysis the nuclei marked with an asterisk in table 7 . They include nuclei $A < 89$ for which the corresponding sum-rule value is very low and deformed nuclei for which one can think that our treatment is not suitable.

By use of formula (1.1) we extract values of K_A^S . Two effects must be taken into account i) the value of the mean square radius and ii) the width of the resonance in order to go from the peak energy to the value of $\tilde{E}_3$. This is illustrated in table 8 . The values in columns A and B have been obtained by using for the energy the peak energy and for the radius $\langle r^2\rangle^{1/2} = \sqrt{3/5}\ 1.2\ A^{1/3}$ fm. and $\langle r^2\rangle^{1/2} = (0.86\ A^{1/3} + 0.\bar{47})$ fm [21] respectively. This last value is obtained by analyzing (α,α') scattering and is also expected from theoretical considerations to be more accurate than the former one. By comparing columns A and B it can be seen that the effect of refining the value of $\langle r^2\rangle^{1/2}$ is to increase the values of K_A^S and to reduce its spread in the region considered $89 \leq A \leq 208$. To estimate the effect of the width Γ of the resonance when going from the peak energy to the value of $\tilde{E}_3$, we used

$$(E_{peak})^2 + 3\gamma^2 = (\tilde{E}_3)^2 \qquad (4.1)$$

where

$$\gamma = \Gamma/2.35 \qquad (4.2)$$

which is exact when the strength has a gaussian shape. Values obtained in this way are reproduced in column C of table 8. We thus consider (see discussion in section 3) the values in column C as the experimental values of K_A^s. As can be seen, the effect of the width is to increase K_A^s (compare columns B and C). The values of K_A^s lie in the range of 121-144 MeV, 121-147 MeV, 137-155 MeV, 138-141 MeV for $89 \leq A \leq 208$ for the four sets of experimental data showing in the first three cases a spread of 20 MeV (there are only three points in the last set).

The comparison with the theoretical curve of fig. 7 can be seen on fig. 8. Error bars of $\sim$ 10 Mev on the experimental points have not been represented on the figure, for clarity. Although the agreement with the Oak-Ridge data is excellent, it seems that on the average the experimental points, for medium nuclei, lie under the theoretical curve. However one should keep in mind that the percentage of EWSR exhausted by the experimental strength distribution decreases from $\sim$ 100% in heavy nuclei to $\sim$ 25% in light systems. The method used to calculate $\tilde{E}_3$ from the peak energy assuming a gaussian shape may then underestimate the true value in medium nuclei if some strength is missing at higher energy.

4.2. Three-parameter fit.

Before trying to extract values of K_{nm} , K_s and K_δ by performing a best fit using the experimental data, we have checked the method by fitting the calculated points in the physical region only, with the following $A^{-1/3}$ -expansion

$$K_A^S = K_{nm} + K_s A^{-1/3} + K_\delta \left(\frac{N-Z}{A}\right)^2 + K_{coul} \frac{Z^2}{A^{4/3}} \qquad (4.3)$$

For the Coulomb term, we have used eq.(3.12) together with eq.(3.13). The results given in table 9 show a good overall agreement with the exact values.

The same fitting procedure has then been performed using the experimental values. The results are given in the first three columns of table 10 (except for the Orsay group for which the number of points is too small for such an analysis). One obtains, by comparing the three sets of data, an important spreading of the different coefficients : the variation on K_{nm} is of 150% and on K_s and K_δ , of 300%. Besides, these values are rather unstable. The fact of excluding or including light or

deformed nuclei in the fit, of using slightly different extimations for $\langle r^2 \rangle$ or $\tilde{E}_3$ has large influences on the results. This conclusion should be compared with the results presented in ref.[22] in which they use the set Texas A&M of table 8 and obtain $K_{nm} = (274 \pm 40)$ MeV by using $K_{coul} = - \frac{6}{5} \frac{Z^2 e^2}{r_o} A^{-4/3}$. When using the correct expression given in eq. (3.14) one obtains in fact $K_{nm} = (357 \pm 35)$ MeV (see table 10). Let us remember that inclusion of the data corresponding to the Zn isotopes modifies considerably the results [22].

Strictly speaking, if one takes into account the error bars, the three sets of coefficients presented in table 10 , if determined with poor accuracy, are compatible, although the Oak Ridge data indicate a smaller value for K_{nm} (the large error bars are due to the small number of points). Altogether they would lead to an estimate of K_{nm} of the order of 290 MeV with a considerable error bar. However this would be an incorrect conclusion as we shall now show.

Indeed, the matrix correlation between the coefficient in the fit shows, in the three cases, strong correlations. They express the fact that in the range $90 \leq A \leq 208$, $A^{-1/3}$ takes values in a narrow range (from 0.22 to 0.17) and so does also the asymmetry square $\delta^2 = ((N-Z)/A)^2$ (from 0.01 to 0.04). Consequently only the combination $\bar{K} = K_{nm} + \langle A^{-1/3} \rangle K_s + \langle \delta^2 \rangle K_\delta$ can be accurately determined from the data through the fitting procedure (the brackets indicate some averaging of the variables). It is then somehow illusive to look separately at the three first columns of

table 10 . The values of $\bar{K}$, calculated taking $\langle A^{-1/3} \rangle = 0.2$ and $\langle \delta^2 \rangle = 0.025$, are given in the last column. One can see that they are almost identical (to 3%) for the three sets of data, showing a surprisingly good compatibility between them (notice that the Coulomb contribution is not included in $\bar{K}$). The conclusion of this discussion is that the three-parameter fitting procedure is rather misleading and does not give much information on each of the coefficients. In order to extract K_{nm}, one has to reduce the number of free parameters and therefore use the theoretical analysis of K_A^s made in section 3.

4.2. One-parameter fit.

We have then performed another fit to the data using eq.(3.15) instead of eq. (4.3). As a check, we have made this one-parameter fit to the calculated incompressibilities, varying α from -1 to -1.2 and K_δ from -250 to -350 MeV. For both interactions, one recovers the theoretical values of K_{nm} with an accuracy of 5%. The results of the fit to the experimental sets of data, obtained when fixing $\alpha = -1$ and $K_\delta = -300$ MeV are presented in table 11 . We have given the result obtained with the data of the Orsay group as it now makes sense to use their three experimental points in a one-parameter fit. Here also it is found that, when one varies α and K_δ as mentioned above for the calculated points, K_{nm} is changed at most by 5% in all cases. The different sets of data give values of K_{nm} which agree remarkably well. This stability has to be contrasted with the spreading of the values obtained in the three-parameter fit.

An average value for K_{nm} is, from table 11 , K_{nm} = 220 MeV. An estimate of the error bar should take into account the various approximations made to derive eq. (3.15). The above 5% gives an idea of the accuracy of the theoretical analysis. Taking into account the experimental uncertainties might, at most, double this number. The conclusion can then be stated as

$$K_{nm} = (220 \pm 20) \text{ MeV}$$
$$K_{s} = (-240 \pm 70) \text{ MeV}$$
$$K_{\delta} = (-300 \pm 100) \text{ MeV}$$

5. Conclusion.

In this paper, we have studied the asymptotic behaviour of two RPA sum-rules evaluated using a Thomas-Fermi approximation ; they correspond to the so-called scaling and constrained models of the Giant Monopole Resonance. We have confirmed the main recent finding of Jennings and Jackson which states that the asymptotic limits of the incompressibilities corresponding to the two models are different, i.e. that the operator $Q = \sum_i r_i^2$ is not a collective operator in the infinite medium . When fitting the experimental sets of nuclear incompressibilities with an $A^{-1/3}$-expansion, there results an ambiguity in the theoretical interpretation of the coefficients of the expansion . This ambiguity has been analyzed by means of a detailed study of the theoretical coefficients (using effective interactions) corresponding to the two incompressibilities considered here. The condition that has to be fulfilled so that this theoretical interpretation be possible is that the $A^{-1/3}$-expansion is rapidly convergent. We have shown that this is obtained in the scaling model, because in that case the transition density clearly separates the volume from the surface region ; on the contrary, in the constrained model, this is not the case, so that an important curvature term is present, which cannot be extracted when considering real nuclei. Next, some semi-empirical relations between the coefficients of the expansion of K_A^s have been established : the surface term has been found almost equal to the volume ter in magnitude and of opposite sign ; an accurate expression for the Coulomb coefficient, related to K_{nm} only, has been derived and it is shown that the asymmetry coefficient i) takes similar values for a large variety of interactions and ii) contributes $\sim$ 15% to the value of K_A^s. Hence we find that the following expression

$$K_A^S = K_{nm} + \alpha K_{nm} A^{-1/3} + K_\delta \left(\frac{N - Z}{A}\right)^2 - \frac{3}{5}\frac{e^2}{r_o}\left(12.5 - \frac{1215}{K_{nm}}\right)\frac{Z^2}{A^{4/3}} \qquad (5.1)$$

with $\alpha = -1$ and $K_\delta = -300$ MeV reproduces the calculated values within $\sim 5\%$. When analyzing the experimental data, we find that the still limited number and accuracy of experimental points does not allow to extract much information on the volume, surface and asymmetry coefficients separately in a three-parameter fit to the data. This should not be surprising if one considers that when analyzing nuclear masses, for which both the number of data and the accuracy are incomparably greater, one has to use rather sophisticated methods in order to substract shell effects before determining a few coefficients by a best fit to the liquid drop values ; still, certain coefficients are not known with great accuracy. When analyzing the experimental incompressibilities, we think that a reasonable method is to use the theoretical relations in order to reduce the number of free parameters. Using eq.(5.1) in a one-parameter fit to the data leads to a value $K_{nm} = (220 \pm 20)$ MeV. This value is in good agreement with the one obtained from microscopic analysis as well as with the Droplet Model value deduced from static properties of nuclei.

It is a pleasure to acknowledge B.K. Jennings for some detailed discussions concerning his work with A.D. Jackson. We would also like to thank N. Van Giai for discussions on the RPA results and C. Schmit for his numerous and relevant comments at different stages of this work. One of us (J.M.) thanks the members of the Division de Physique Théorique of IPN-Orsay for a very pleasant stay during which this work was started

Appendix A

In this appendix, assuming a constant density inside the nucleus at equilibrium, we derive eq. (3.2). We start with the following expression for the total energy

$$E = \int_0^R H(\rho)\, d\vec{r}' + 4\pi R^2 \Sigma \qquad (A\text{-}1)$$

where Σ is the surface tension.

The equilibrium quantities ρ and R are determined by varying E with the constraint of a fixed number of particles :

$$\frac{\partial E}{\partial R} = 0 = 4\pi R^2 \left[H(\rho) - \mu\rho \right] + 8\pi \Sigma R \qquad (A\text{-}2)$$

$$\frac{\partial E}{\partial \rho} = 0 = \frac{\partial H}{\partial \rho} - \mu \qquad (A\text{-}3)$$

where μ is the Lagrange multiplier corresponding to particle conservation. When the external field is switched on, one has to minimize the total energy with two constraints :

$$E - \tilde{\mu} A - \lambda \langle r^2 \rangle = \int_0^{\tilde{R}} H(\tilde{\rho})\, d\vec{r}' + 4\pi \Sigma R^2 - \tilde{\mu} \int_0^{\tilde{R}} \tilde{\rho}\, d\vec{r}' - \lambda \int_0^{\tilde{R}} \tilde{\rho}\, r^2 d\vec{r}' \quad (A\text{-}4$$

where $\tilde{R}$, $\tilde{\rho}$ and $\tilde{\mu}$ are the new values of R, ρ and μ .

Writing

$$\tilde{R} = R + \delta R \qquad (A\text{-}5.a)$$

$$\tilde{\rho} = \rho + \delta\rho \qquad (A\text{-}5.b)$$

$$\tilde{\mu} = \mu + \delta\mu \qquad (A\text{-}5.c)$$

where ρ , R and μ are solutions of (A-2) and (A-3), one can rewrite eq.(A-4) as :

$$\int_0^{R+\delta R} \left[H(\rho) + \frac{\partial H}{\partial \rho}\delta\rho + \frac{1}{2}\frac{\partial^2 H}{\partial \rho^2}(\delta\rho)^2 \right] d\vec{r}' + 4\pi\Sigma (R+\delta R)^2$$

$$- (\mu+\delta\mu)\int_0^{R+\delta R} (\rho+\delta\rho)\, d\vec{r}' - \lambda \int_0^{R+\delta R} (\rho+\delta\rho)\, r^2 d\vec{r}' \qquad (A-6)$$

This quantity has to be stationary against variations of R and $\delta\rho$. Keeping only first order terms, one gets :

$$0 = H(\rho) + \frac{\partial H}{\partial \rho}\delta\rho - (\mu+d\mu)\rho - \mu\delta\rho - \lambda\rho R^2 + 2\frac{\Sigma}{R}\left(1-\frac{\delta R}{R}\right) \qquad (A-7.$$

$$0 = \frac{\partial H}{\partial \rho} + \frac{\partial^2 H}{\partial \rho^2}\delta\rho - \mu - d\mu - \lambda r^2 \qquad (A-7.$$

By use of eqs.(A-2) and (A-3), eqs.(A-7.a) and (A-7.b) reduce to :

$$\delta\mu + \lambda R^2 + \frac{2\Sigma}{\rho R^2}\delta R = 0 \qquad (A-8.a$$

$$\frac{\partial^2 H}{\partial \rho^2}\delta\rho - \delta\mu - \lambda r^2 = 0 \qquad (A-8.b$$

which gives, after introducing $\frac{\partial^2 H}{\partial \rho^2} = \frac{K}{9\rho}$

$$\delta\rho = \frac{9\rho}{K}\left[\lambda(r^2-R^2) - 2\frac{\Sigma}{\rho}\frac{\delta R}{R^2}\right] \qquad 0<r<R \qquad (A-9.$$

To first order, one also has

$$\delta\rho = \rho - \frac{18\,\Sigma\,\delta R}{K R^2} \qquad R<r<R+\delta R \qquad (A-9.$$

Next, one writes the conservation of the number of particles :

$$A = \int_0^{R+\delta R} (\rho+\delta\rho)\, d\vec{r}' = \int_0^{R} \rho\, d\vec{r}' + 4\pi R^2 \rho\,\delta R \int_0^{R+\delta R} \delta\rho\, d\vec{r}' \qquad (A-10$$

which implies, to first order :

$$\frac{g\rho}{\kappa}\left[-\frac{2}{15}\lambda R^5 - \frac{2}{3}\frac{\Sigma}{\rho}R\delta R\right] + R^2\rho\delta R = 0 \qquad (A\text{-}11)$$

or :

$$\delta R = \frac{6}{5}\frac{\lambda}{\kappa}R^3\frac{1}{1-\frac{6\Sigma}{\kappa R\rho}} \simeq \frac{6}{5}\frac{\lambda}{\kappa}R^3\left(1+\frac{6\Sigma}{\kappa R\rho}\right) \qquad (A\text{-}12)$$

Inserting (A-12) into (A-9a) leads to :

$$\delta\rho = g\rho\frac{\lambda}{\kappa}\left[r^2 - R^2 - \frac{12}{5}\frac{\Sigma R}{\kappa\rho}\right] \qquad 0<r<R \qquad (A\text{-}13.a)$$

$$\delta\rho = \rho - \frac{108}{5}\lambda\frac{\Sigma R}{\kappa^2} \qquad R<r<R+\delta R \qquad (A\text{-}13.b)$$

if one keeps terms linear in Σ only.

The mean square radius can now be calculated :

$$\langle r^2\rangle = \frac{4\pi}{A}\int_0^{R+\delta R}(\rho+\delta\rho)r^2\,d\vec{r} = \frac{3}{5}R^2\left[1+\frac{24}{7}\frac{R^2\lambda}{\kappa}\left(1+\frac{21}{5}\frac{\Sigma}{R\kappa\rho}\right)\right] \qquad (A\text{-}14)$$

so that :

$$\left.\frac{d\langle r^2\rangle}{d\lambda}\right|_{\lambda=0} = \frac{72}{35}\frac{R^4}{\kappa}\left(1+\frac{21}{5}\frac{\Sigma}{R\kappa\rho}\right) \qquad (A\text{-}15)$$

finally :

$$K_A^c = 4\frac{\langle r^2\rangle^2}{\left.\frac{d}{d\lambda}\langle r^2\rangle\right|_{\lambda=0}} = \frac{7}{10}\kappa\left(1-\frac{21}{5}\frac{\Sigma}{R\kappa\rho}\right) \qquad (A\text{-}16)$$

In eq. (A-16),

$$\kappa = g\rho\frac{\partial^2 H}{\partial\rho^2} \qquad (A\text{-}17)$$

is calculated at the equilibrium density of the nucleus without constraint. Expanding eqs.(A-2) and (A-3) around equilibrium density of infinite nuclear matter ρ_{nm}, one gets :

$$\frac{\rho - \rho_{nm}}{\rho_{nm}} = 18 \frac{\Sigma}{RK\rho} \qquad (A.18)$$

and from (A-17) :

$$K = 9\rho_{nm} \left.\frac{\partial^2 H}{\partial \rho^2}\right|_{\rho_{nm}} + 9 \frac{\rho - \rho_{nm}}{\rho_{nm}} \rho_{nm} \left.\frac{\partial^2 H}{\partial \rho^2}\right|_{\rho_{nm}} + 9 \frac{\rho - \rho_{nm}}{\rho_{nm}} \rho_{nm}^2 \left.\frac{\partial^3 H}{\partial \rho^3}\right|_{\rho_{nm}}$$

$$= K_{nm} + \frac{\rho - \rho_{nm}}{\rho_{nm}} K_{nm} + 9 \frac{\rho - \rho_{nm}}{\rho_{nm}} \rho_{nm}^2 \left.\frac{\partial^3 H}{\partial \rho^3}\right|_{\rho_{nm}} \qquad (A-19)$$

Inserting (A-18) and (A-19) into (A-16) leads to eq.(3.2), if one makes use of the relation :

$$4\pi R^2 \Sigma = a_s A^{2/3} \qquad (A-20)$$

where a_s is the surface energy.

Appendix B

In order to derive the expansion of

$$I_{\nu,\mu} = \int_0^\infty \frac{r^\mu}{(1+\exp\frac{r-R}{a})^\nu}\, dr \qquad (B.1)$$

in powers of $\frac{a}{R}$, it is useful to use recurrence relations. By integration by parts of (B-1) one obtains

$$I_{\nu,\mu} = \frac{\nu}{a(\mu+1)}\left[I_{\nu,\mu+1} - I_{\nu+1,\mu+1} \right] \qquad (B-2)$$

By differentiating with respect to R eq. (B-1), one obtains

$$\frac{d I_{\nu,\mu}}{dR} = \frac{\nu}{a}\left[I_{\nu,\mu} - I_{\nu+1,\mu} \right] \qquad (B-3)$$

By changing μ into $\mu - 1$ in eq. (B-2) and substracting to eq. (B-3) one gets

$$\mu\, I_{\nu,\mu-1} = \frac{d I_{\nu,\mu}}{dR} \qquad (B-4)$$

In the problem we are dealing with, only integer values of ν and 3ν in the case of S-III and 6ν in the case of SkM appear. It is therefore sufficient to evaluate $I_{1/6,2}$ $I_{2/3,2}$ and $I_{1,2}$. The expansion is straightforward

$$I_{\nu,2} = \frac{R^3}{3}\left[1 + 3\eta^{(0)}_{\nu,2}\frac{a}{R} + 3\eta^{(1)}_{\nu,2}\frac{a^2}{R^2} + 3\eta^{(2)}_{\nu,2}\frac{a^3}{R^3}\right] + \omega\left(\frac{a}{R}\right) \quad (B-5)$$

where $\omega(\frac{a}{R})$ is a term going to zero faster than any power of $\frac{a}{R}$

In eq. (B-5)

$$\eta^{(0)}_{\nu,2} = \frac{1}{\nu} + \sum_{p=1}^{\infty} \gamma_{p,\nu}\left(\frac{1}{p} + \frac{1}{p+\nu}\right) \quad (B-6.a)$$

$$\eta^{(1)}_{\nu,2} = \frac{2}{\nu^2} + 2\sum_{p=1}^{\infty} \gamma_{p,\nu}\left(-\frac{1}{p^2} + \frac{1}{(p+\nu)^2}\right) \quad (B-6.b)$$

$$\eta^{(2)}_{\nu,2} = \frac{2}{\nu^3} + 2\sum_{p=1}^{\infty} \gamma_{p,\nu}\left(\frac{1}{p^3} + \frac{1}{(p+\nu)^3}\right) \quad (B-6.c)$$

and

$$\gamma_{p,\nu} = (-)^p \frac{\Gamma(\nu+p)}{\Gamma(\nu)\, p!}$$

Notice that the series (B-6.a) does not converge as soon as $\nu > 1$

We have calculated η_i (i = 1,2,3) for $\nu = \frac{2}{3}$ and $\nu = \frac{1}{6}$. For the other values of ν we have used eq. (B-3) which gives :

$$\eta^{(0)}_{\nu+1,\mu} = \eta^{(0)}_{\nu,\mu} - \frac{1}{\nu} \quad (B-7.a)$$

$$\eta^{(1)}_{\nu+1,\mu} = \eta^{(1)}_{\nu,\mu} - \frac{\mu}{\nu}\eta^{(0)}_{\nu,\mu} \quad (B-7.b)$$

$$\eta^{(2)}_{\nu+1,\mu} = \eta^{(2)}_{\nu,\mu} - \frac{\mu-1}{\nu}\eta^{(1)}_{\nu,\mu} \quad (B-7.c)$$

Some typical values are listed in table 12. More generally one can prove [28] that *

---

* Notice that what is denoted here by $\eta^{(k)}_{\nu,\mu}$ is denoted in ref. (28) by $\binom{\mu}{k}\eta^{(k)}_{\nu}$.

$$\eta^{(k)}_{\nu,\mu} = (-)^k \binom{\mu}{k} \int_0^\infty u^k \left[\frac{1 + (-)^k e^{-u\nu}}{(1 + e^{-u})^\nu} - 1 \right] du \qquad (B-8)$$

where $\binom{\mu}{k}$ denotes the binomial coefficient.

One recovers, in the special case $k = 0$ and $\mu = 2$, the integral expressions given in the Appendix of ref. [17].

In order to show the accuracy of the expansion of $I_{\nu,\mu}$ in powers of $\frac{a}{R}$ for different values of μ, we have calculated the values of $\frac{\mu+1}{R^{\mu+1}} I_{\nu,\mu}$ whose leading term, when R goes to infinity, is obviously one. Results are presented in table 13, for illustration, in the case $\nu = 5/3$. The bad convergence of the expansion when μ increases can be seen in the following manner. Starting from

$$\frac{\mu+1}{R^{\mu+1}} I_{\nu,\mu} = 1 + (\mu+1)\,\eta^{(0)}_{\nu,\mu} \frac{a}{R} + (\mu+1)\,\eta^{(1)}_{\nu,\mu} \frac{a^2}{R^2} + (\mu+1)\,\eta^{(2)}_{\nu,\mu} \frac{a^3}{R^3} + \ldots \qquad (B.9)$$

and using eq. (B-4) or (B-8), one obtains

$$\frac{\mu+3}{R^{\mu+3}} I_{\nu,\mu+2} = 1 + (\mu+3)\,\eta^{(0)}_{\nu,\mu} \frac{a}{R} + \frac{(\mu+2)(\mu+3)}{\mu}\,\eta^{(1)}_{\nu,\mu} \frac{a^2}{R^2} + \frac{(\mu+1)(\mu+2)(\mu+3)}{\mu(\mu-1)}\,\eta^{(2)}_{\nu,\mu} \frac{a^3}{R^3}$$

So if μ increases by 2 in $I_{\nu,2}$, the surface term is multiplied by $\frac{5}{3}$, the curvature term $\frac{10}{3}$ and the following one by 10, as can be checked in table 13.

Appendix C

We now show that the quantity $\rho_{nm}^2 H'''$ is correlated to the incompressibility modulus K itself.

The expansion of the total energy in nuclear matter up to third order around equilibrium density writes :

$$\frac{H(\rho)}{\rho} = \lambda_{nm} + \frac{K}{18}\left(\frac{\delta\rho}{\rho_{nm}}\right)^2 + \frac{1}{6}\left(\rho_{nm}^2 H''' - \frac{K}{3}\right)\left(\frac{\delta\rho}{\rho_{nm}}\right)^3 \qquad (C-1)$$

where

$$\frac{\delta\rho}{\rho_{nm}} = \frac{\rho - \rho_{nm}}{\rho_{nm}}$$

Thus using, as is often done, the quadratic approximation for $\frac{H(\rho)}{\rho}$ corresponds to setting

$$\rho_{nm}^2 H''' = \frac{K}{3} \qquad (C-2)$$

This is obviously not a good approximation at low density, as can be checked by considering the energy at zero density :

$$\left(\frac{H}{\rho}\right)_{\rho=0} = \lambda_{nm} + \frac{K}{18}$$

If one asks, using the cubic approximation, that the energy be zero at zero density, one then gets

$$\rho_{nm}^2 H''' = \frac{2}{3}K + 6\lambda_{nm} \sim \frac{2}{3}K - 90 \quad [MeV] \qquad (C-3)$$

However this somehow over corrects the true behaviour because

at very low density the kinetic energy dominates the potential energy ; $\frac{H(\rho)}{\rho}$ is then slightly positive in this region while using eq.(C.3) would give $\frac{H(\rho)}{\rho}$ negative.

We show in table 5 that the average value

$$\rho_{nm}^2 H''' = \frac{\pi}{2} - 45 \qquad [MeV]$$

reproduces the exact value within $\sim$ 10 % for a large variety of effective interactions : eq.(C.4) slightly overestimates the exact value if zero range forces are considered and slightly underestimates the exact value with finite range forces.

REFERENCES

[1] O. Bohigas, A.M. Lane and J. Martorell, Phys. Rep. 51(1979)267.

[2] J.P. Blaizot, Phys. Rep. 64(1980)171.

[3] W.D. Myers and W.J. Swiatecki, Ann. Phys. 55(1969)395 ; W.D. Myers, "Droplet Model of Atomic Nuclei", Plenum Press, New York 1977.

[4] G.F. Bertsch and S.F. Tsiai, Phys. Rep. C18(1975)125.

[5] K.F. Liu and G.E. Brown, Nucl. Phys. A265(1976)385.

[6] K.F. Liu and N.V. Giai, Phys. Lett. 65B(1976)23.

[7] S. Krewald, V. Klemt, J. Speth and A. Faessler, Nucl. Phys. A281(1977)166.

[8] D.M. Brink and R. Leonardi, Nucl. Phys. A258(1976)285.

[9] J. Martorell, O. Bohigas, S. Fallieros and A.M. Lane, Phys. Lett. 60B(1976)313.

[10] K. Goeke, A.M. Lane and J. Martorell, Nucl. Phys. A296(1978)109.

[11] S. Stringari, E.Lipparini, G. Orlandini, M. Traini and R. Leonardi, Nucl. Phys. A309(1978)177.

[12] M. Kohno and K. Ando, Prog. Theor. Phys. 61(1979)1065.

[13] J.P. Blaizot, D. Gogny and B. Grammaticos, Nucl. Phys. A265(1976)315.

[14] B.K.Jennings and A.D.Jackson, Phys. Rep. 66(1980)141.

[15] H. Krivine, J. Treiner and O. Bohigas, Nucl. Phys. A336(1980)155.

[16] M. Beiner, H. Flocard, Nguyen Van Giai and P. Quentin, Nucl. Phys. A238(1975)29.

[17] J.P. Blaizot and Grammaticos, Nucl. Phys. A355(1981)115.

[18] S. Chandrasekhar, "An introduction to the study of stellar structure" (1939), second edition, ed. Dover (1967), p.389.

[19] Chin-Fu Tsang, "On the Microscopic Aspect of Nuclear Structure with Applications to Super-Heavy Nuclei" Ph. D. Thesis, University of California, Lawrence Radiation Laboratory Report, UCRL-18899 (May 1969).

[20] V.R. Pandharipande, Phys. Lett. 31B(1970)685.

[21] I. Brissaud, Y. Le Bornec, B. Tatischeff, L. Bimbot, M.K. Boussel and G. Duhamel, Nucl. Phys. A191(1972)145.

[22] D.H. Young blood, in Proceedings of the Giant Multipole Resonance Topical Conference, Oak Ridge 1979 ; Y.W. Lui, P. Bogucki, J.D. Bronson, U. Garg, C.M. Rozsa and D.H. Youngblood, Phys. Lett. 93B(1980)31.

[23] N. Marty, A. Willis, M. Morlet, R. Frascaria, V. Comparat and P. Kitching, in Proceedings of the Giant Multipole Resonance Topical Conference; Oak Ridge 1979.

[24] F.E. Bertrand, G.R. Satchler, D.J. Horen and A. van der Woude, Phys. Lett. 30B(1979)198.

[25] M. Buenerd , D. Lebrun, Ph. Martin, P. de Saintignon and C. Perrin, Phys. Rev. Lett. 45(1980)1667 ; Ph. Martin, M. Buenerd, D. Lebrun, G. Perrin, P. de Saintignon, G. Duhamel, C. Bonhomme and J. Chauvin, in Proceedings of the International Symposium on Highly Excited States in Nuclei, Osaka 1980.

[26] H Krivine and J. Treiner, Phys. Lett. 88B (1979),212

[27] J. Treiner and H. Krivine, J. of Phys. G, Nucl. Phys. 2, 5 (1976),285

[28] H. Krivine and J. Treiner, to be published in J. of Math. Phys.

[29] F.E. Serr, G.F. Bertsch and J.B.Borysowicz, Phys. Lett. 92B (1980) 241.

[30] G. Eckart, G. Holzwarth and J. da Providencia, "First sound versus zero sound in finite Fermi systems, Siegen preprint December 1980.

[31] S. Fallieros " Electromagnetic Interactions and Nuclear Excitatio Lecture Notes Orsay (1975) p. 11.

[32] O. Bohigas,X. Campi, H. Krivine and J. Treiner, Phys. Lett. 64(1976) 381 ; Y.H. Chu, B.K. Jennings and M. Brack, Phys. Lett. 68B(1977) 407.

TABLE CAPTIONS

TABLE 1 : Values of different nuclear matter quantities corresponding to S-III and SkM forces.

TABLE 2 : Comparison between MTF and RPA sum rules calculations of Ref.[1] of $\tilde{E}_1$ and $\tilde{E}_3$ (see sect. 2.1) with S-III and MTF results with SkM. All quantities are in MeV

TABLE 3 : Values of the coefficients of the $A^{-1/3}$-expansion (1.2) of K_A^s and K_A^c obtained by fitting the incompressibilities calculated using S-III and SkM. Values marked with an asterisk are calculated using analytic expressions given in the text. For the definition of K_s(renorm), $\tilde{K}_s$ and $\tilde{K}_\delta$, see sect.3.3.1 and 3.3.2. All quantities are in MeV.

TABLE 4 : Values of the volume symmetry coefficient in the scaling model $K^s_{\delta,v}$ for different interactions (see Table 4 of Ref.[2]). All quantities are in MeV

TABLE 5 : Comparison between exact and approximate values of $\rho^2_{nm} \frac{d^3H}{d\rho^3}$, in MeV., for different interactions (see ^{nm} table 7 of Ref.[27]).

TABLE 6 : Comparison between values of the incompressibilities corresponding to the scaling model K_A^s calculated using RPA sum rules and using the expansion (3.15) for different forces. RPA values are taken from Ref.[2]. All quantities are in MeV

TABLE 7 : Experimental parameters of giant monopole resonances. Columns a : Peak energy E_{peak}, in MeV. Columns b : widths Γ, in MeV. Columns c : % of EWSR. Data labelled Grenoble, Texas A&M, Oak Ridge and Orsay, taken from Refs[22-25].

TABLE 8 : Incompressibilities of finite nuclei extracted from observed monopole resonances through eq.(11).
Columns A : using the peak energy and $\langle r^2\rangle^{1/2} = 1.2\sqrt{3/5}\, A^{1/3}$ f
Columns B : id. and $\langle r^2\rangle^{1/2} = (0.86A^{1/3} + 0.47\text{fm})$.
Columns C : using $\tilde{E}_3^2 \simeq E_{peak}^2 + 3(\frac{\Gamma}{2.35})^2$ and same as in column B for $\langle r^2\rangle^{1/2}$. See caption of Table 7 and text for further explanation.

TABLE 9 : Values of the coefficients of eq.(4.3) obtained by performing a best fit using the calculated points in the physical region only. For the Coulomb term eq.(3.12) and (3.13) have been used. Exact values already shown in Table 3 are given for comparison. All quantities are in MeV

TABLE 10 : Same calculations as in Table 9 but with the three experimental sets of data. The last column gives the quantity $\bar{K} = K_{nm} + \langle A^{-1/3}\rangle K_s + \langle\delta^2\rangle K_\delta$ with $\langle A^{-1/3}\rangle = 0.2$ and $\langle\delta^2\rangle = 0.025$. All quantities are in MeV

TABLE 11 : Values of K_{nm} deduced from experimental data when fixing $K_s = -K_v$, $K_\delta = -300$ MeV and K_{coul} by eq.(3.12) and (3.13). All quantities are in MeV

TABLE 12 : Coefficients of the expansion eq.(B.6).

TABLE 13 : Contribution of successive terms to $\frac{\mu+1}{R^{\mu+1}} I_{\nu,\mu}$ for $\nu = 5/3$, R = 6 fm and a = 0.5 fm when expanded in powers of a/R. The row labelled $\Sigma(4)$ gives the contribution of the first four terms. "Total" indicates the exact result obtained numerically. The two last rows indicate the relative error when keeping four and two terms in the expansion respectively.

	S-III	SkM
K_{nm}	356 MeV	216 MeV
ρ_{nm}	0.145 fm^{-3}	0.160 fm^{-3}
$r_0 = \left(\frac{3}{4\pi\rho_{nm}}\right)^{1/3}$	1.178 fm	1.143 fm
$\rho_{nm}^2 \frac{d^2H}{d\rho_{nm}^2}$	122 MeV	58 MeV
a_s	20 MeV	19.5 MeV
a_δ	28.2 MeV	30.7 MeV
$L = 3\rho_{nm}\frac{da_\delta}{d\rho_{nm}}$	10.13 MeV	49.33 MeV
$9\rho_{nm}^2\frac{d^2a_\delta}{d\rho_{nm}^2}$	-392.35 MeV	-148.6 MeV

Table 1

	S-III				SkM	
	$\hat{E}_1$		$\hat{E}_3$		$\hat{E}_1$	$\hat{E}_3$
	MTF	RPA	MTF	RPA	MTF	MTF
^{16}O	26.6	28.2	32.4	34.5	22.4	25.5
^{40}Ca	24.7	25.6	27.7	28.5	20.2	21.8
^{90}Zr	21.2	22.1	22.6	23.4	17.0	17.7
^{120}Sn	19.3		20.6		15.5	16.1
^{208}Pb	16.2	16.9	17.2	17.9	12.9	13.3

Table 2

	S-III		SkM	
	Constrained model	Scaling model	Constrained model	Scaling model
K_v	249.2*	356*	151.2*	216*
K_s	582 (362*)	-516	470 (272*)	-305
K_c	-2920	275	-2180	340
K_s(renorm)		-461		-237
$\tilde{K}_s$		-356		-216
$K_{\delta,v}$	-319*	-456*	-251*	-359*
$K_{\delta,s}$	-3540	420	-1340	435
$\tilde{K}_\delta$		-372		-272
K_{coul}	-8.7*	-6.(-6.0*)	-6.9*	-5.(-4.7*)

Table 3

B1	D1	Ska	S-III	S-IV	SkM
-438.8	-352.2	-444.0	-455.8	-507.1	-358.6

Table 4

Interaction	K_{nm}	$\rho_{nm}^2 \frac{d^3H}{d\rho^3_{nm}}$	$\frac{K_{nm}}{2} - 45$
LEV	270	100	90
PEAR	240	87	75
BAR	293	110	102
B1β	184	53	47
G-O	182	52	46
SG-O	253	90	82
S-II	342	115	126
S-III	356	122	133
S-IV	325	106	118
S-V	306	94	108
SkM	216	58	63

Table 5

		^{208}Pb	^{90}Zr	^{40}Ca	^{16}O
S-III	RPA	242	242	227	200
	Eq. (3.15)	243	246	232	204
S-IV	RPA	217	218	203	181
	Eq. (3.15)	216	222	211	186
Ska	RPA	174	175	165	147
	Eq. (3.15)	171	177	169	149

Table 6

Table 7

	Grenoble		TEXAS A & M			OAK RIDGE			ORSAY	
	a	b	a	b	c	a	b	c	a	b
^{58}Ni *						19.8 ± 0.5	3.5 ± 0.5	30 ± 10		
^{64}Zn *			18.2 ± 0.5	4.3 ± 0.9	25 ± 16					
^{66}Zn *	17.9	2.4	18.4 ± 0.7	4.1 ± 1.1	26 ± 16					
^{68}Zn *	17.8	4.0								
^{89}Y	16.3	3.1								
^{90}Zr	16.4	3.6	16.2 ± 0.5	3.5 ± 0.3	90 ± 20	17.5 ± 0.5	3.0 ± 0.5	60 ± 25	17.2 ± 0.5	4.3 ± 0.3
^{92}Mo	16.35	4.0								
^{96}Mo	16.4	3.5								
^{100}Mo	16.0	3.25								
^{107}Ag	15.9	3.7								
^{108}Pd	16.25	4.0								
^{110}Cd	15.95	4.1								
^{116}Cd	15.75	3.4								
^{115}In	16.1	2.4								

Table 7 (continued)

	a	b	a	b	c	a	b	c	a	b
^{116}Sn	15.55	3.2	15.6 ± 0.3	4.1 ± 0.3	180 ± 50					
^{118}Sn			15.5 ± 0.6	4.1 ± 0.7	∿150					
^{120}Sn	15.45	3.25	15.4 ± 0.5	3.8 ± 0.6	∿180	16.8 ± 0.5	3.5 ± 0.5	100 ± 25	16.1 ± 0.4	3.0 ± 0.3
^{124}Sn	14.85	3.2	14.8 ± 0.4	3.7 ± 0.6	180 ± 70					
^{140}Ce	14.8	3.0								
^{144}Sm	14.7	2.9	14.8 0.3	2.9 ± 0.2	85 ± 20	15.5 ± 0.5	2.5 ± 0.5	100 ± 25		
^{148}Sm			14.7 ± 0.5	3.0 ± 0.5	100 ± 40					
^{150}Sm	15.1	3.0								
^{152}Sm	14.8	3.1								
^{154}Sm*			15.1 ± 0.6	3.8 ± 0.7	102 ± 40	15.5 ± 0.5	2.5 ± 0.5	100 ± 25		
^{169}Tm*	14.7	2.5								
^{175}Lu*	14.4	3.0								
^{181}Ta*	14.2	2.5								
^{197}Au*	13.4	2.4				13.6 ± 0.5	3.0 ± 0.5	100 ± 25		
^{208}Pb	13.2	2.8	13.7 ± 0.4	3.0 ± 0.5	90 ± 20	13.4 ± 0.5	3.0 ± 0.5	90 ± 25	13.5 ± 0.3	2.8 ± 0.2

	Grenoble			Texas A&M			Oak Ridge			Orsay		
	A	B	C	A	B	C	A	B	C	A	B	C
^{58}Ni							122.3	136.4	138.7			
^{64}Zn				110.4	122.1	125.8						
^{66}Zn	109.0	120.2	121.4	115.2	127.1	130.5						
^{68}Zn	109.9	121.0	130.4									
^{89}Y	110.3	119.0	121.3									
^{90}Zr	112.5	121.3	124.4	109.8	118.3	121.3	128.1	138.1	140.3	123.8	133.4	137.9
^{92}Mo	113.5	122.1	126.1									
^{96}Mo	117.5	126.0	129.1									
^{100}Mo	114.9	122.9	125.6									
^{107}Mo	118.7	126.4	130.1									
^{108}Pd	124.8	132.7	137.1									
^{110}Cd	121.7	129.3	133.9									
^{116}Cd	122.9	130.1	133.4									
^{115}In	127.7	135.3	136.9									
^{116}Sn	119.8	126.8	129.8	120.6	127.7	132.5						
^{118}Sn				120.4	127.3	133.8						
^{120}Sn	121.0	127.8	130.9	120.2	127.0	131.2	143.0	151.1	154.7	131.4	138.8	141.4
^{124}Sn	114.2	120.4	123.4	113.5	119.6	123.7						
^{140}Ce	123.0	128.7	131.5									
^{144}Sm	123.7	129.1	131.8	125.4	130.9	133.6	137.5	143.5	145.6			
^{148}Sm				126.0	131.3	134.2						
^{150}Sm	134.1	139.6	142.6									
^{152}Sm	129.9	135.2	138.4									
^{154}Sm				136.5	141.8	146.7	143.8	149.5	151.6			
^{169}Tn	137.6	142.2	144.4									
^{175}Lu	135.1	139.4	142.7									
^{181}Ta	134.4	138.3	140.6									
^{197}Au	126.7	129.7	132.0				130.5	133.6	137.2			
^{208}Pb	127.4	130.1	133.3	137.3	140.2	143.8	131.3	134.1	137.8	133.3	136.1	139.3

Table 8

		K_{nm}	K_s	K_δ
S-III	exact	356	-461	-372
	fit	365 ± 3	-433 ± 10	-404 ± 46
SkM	exact	216	-237	-272
	fit	236 ± 3	-277 ± 10	-344 ± 43

Table 9

	K_{nm}	K_s	K_δ	$\overline{K}$
Grenoble	300 ± 29	-608 ± 120	-475 ± 176	167
Texas	357 ± 35	-883 ± 148	-492 ± 210	168
Oak-Ridge	206 ± 146	-143 ± 571	-148 ± 807	174

Table 10

	Grenoble	Texas	Oak-Ridge	Orsay
K_{nm}	213 ± 2	214 ± 5	231 ± 4	222 ± 3

Table 11

ν	$\eta^{(0)}_{\nu,2}$	$\eta^{(1)}_{\nu,2}$	$\eta^{(2)}_{\nu,2}$
$\frac{7}{6}$	-0.245088	3.023514	-1.001862
$\frac{2}{3}$	0.741020	5.257918	5.285190
$\frac{5}{3}$	-0.758980	3.03486	-2.60169

Table 12

μ	2	4	6	8
$(\frac{a}{R})^0$	1	1	1	1
$(\frac{a}{R})^1$	-0.18975	-0.31624	-0.44274	-0.56924
$(\frac{a}{R})^2$	0.06323	0.21077	0.44258	0.75872
$(\frac{a}{R})^3$	-0.00452	-0.04517	-0.15809	-0.37941
$\sum$ (4)	0.86896	0.84933	0.84175	0.81007
Total	0.86896	0.8582	0.8959	0.8759
$\sum$(4)/Total	$<10^{-5}$%	1%	6%	8%
$\sum$(2)/Total	7%	26%	60%	103%

Table 13

FIGURE CAPTIONS

Fig. 1 : Comparison between the transition densities (eqs.(2.12) and (2.13)) calculated using S-III force in ^{40}Ca. Full curves correspond to self-consistent RPA calculations obtained via sum-rules. Dashed curves correspond to MTF calculations (no spin-orbit interaction included).

Fig. 2 : K_A^C and K_A^S calculated in real nuclei (including Coulomb interaction).

Fig. 3 : Plot of the curves K_A^C and K_A^S as functions of $A^{-1/3}$ for systems with N = Z and no Coulomb interaction. Lines are drawn to guide the eye.

Fig. 4 : Comparison between the transition densities corresponding to the scaling and to the constrained models in the systems $^{40}_{20}X$, $^{90}_{45}X$ and $^{208}_{104}X$ using SkM interaction.

Fig. 5 : Same as fig. 4 for $^{5000}_{2500}X$.

Fig. 6 : Asymmetry term K_δ plotted as a function of $A^{-1/3}$ for scaling and constrained case and two different forces.

Fig. 7 : Contributions of the different terms of the $A^{-1/3}$-expansion to the incompressibility K_A of finite nuclei (scaling case). The values of the coefficients are very close to those corresponding to the effective interaction SkM.

Fig. 8 : Values of empirical incompressibilities taken from columns C of table 8. The line corresponds to the incompressibilities obtained with the formula (3.15) illustrated on fig. 7.

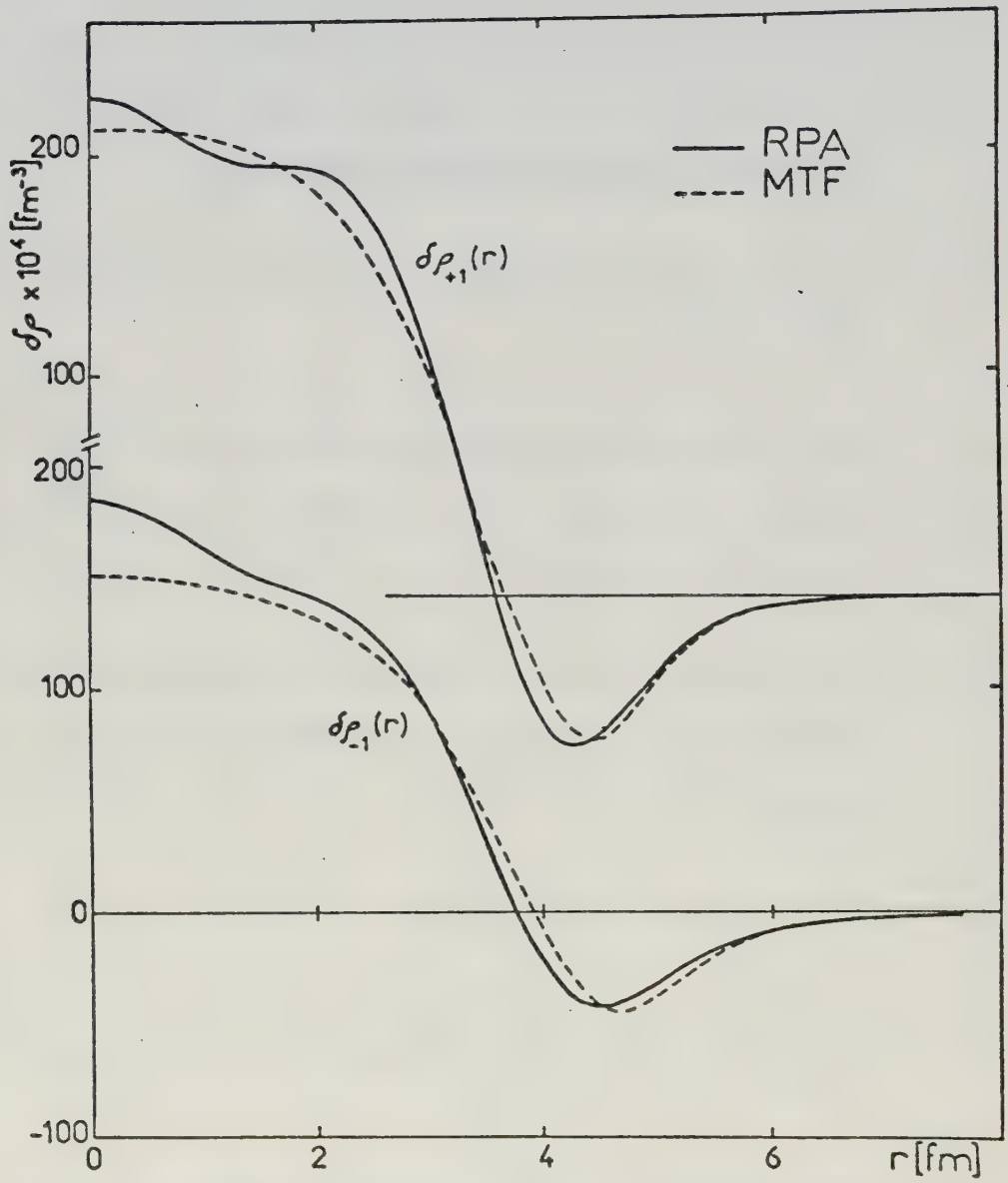

RPA
MTF
$\delta\rho_{+1}(r)$
$\delta\rho_{-1}(r)$
$\delta\rho \times 10^4\,[fm^{-3}]$
200
100
200
100
0
-100
0
2
4
6
r[fm]

Fig. 1

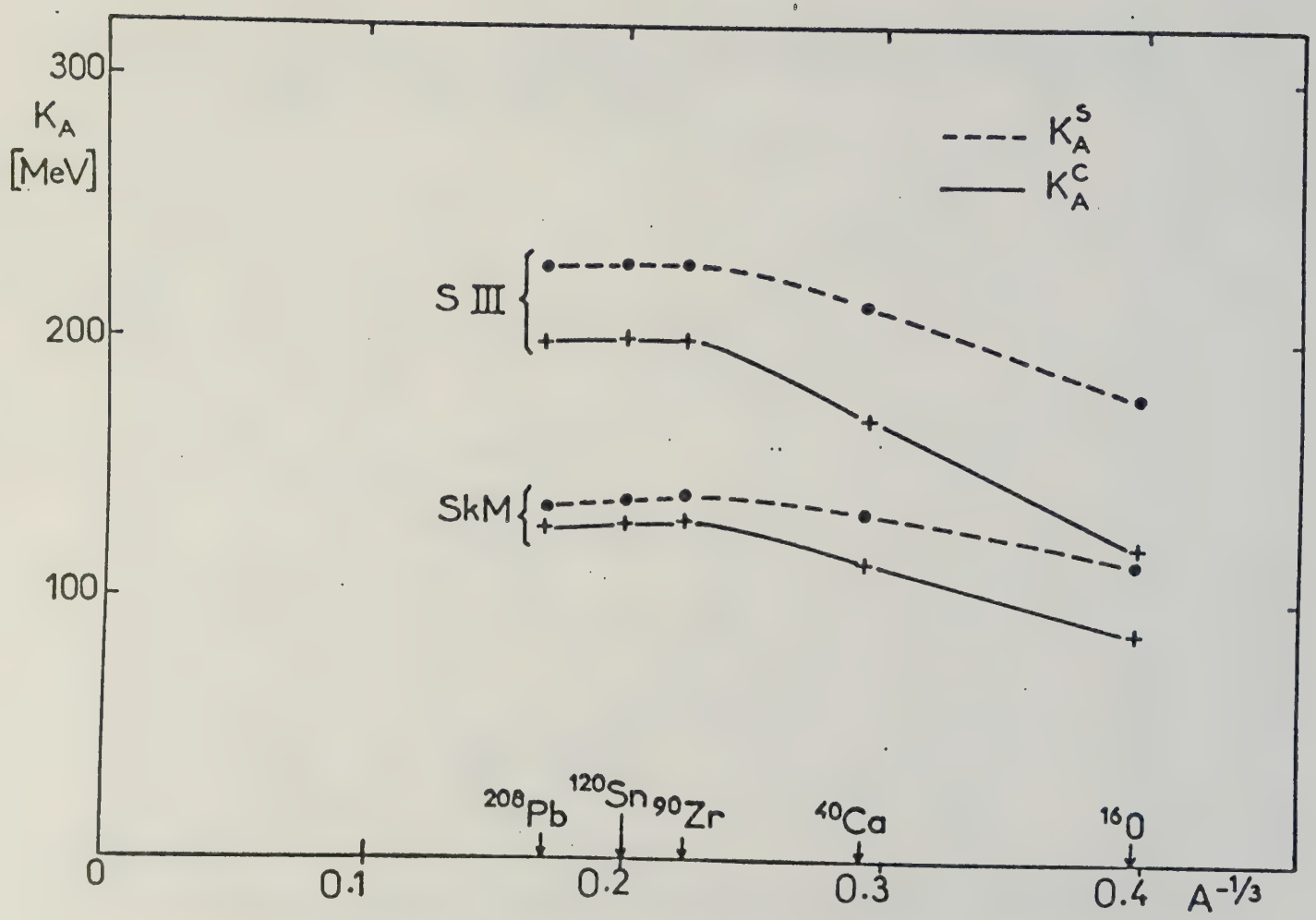

300
K_A
[MeV]
200
100
0
0.1
0.2
0.3
0.4
$A^{-1/3}$
K_A^S
K_A^C
S III
SkM
^{208}Pb
^{120}Sn
^{90}Zr
^{40}Ca
^{16}O

Fig. 2

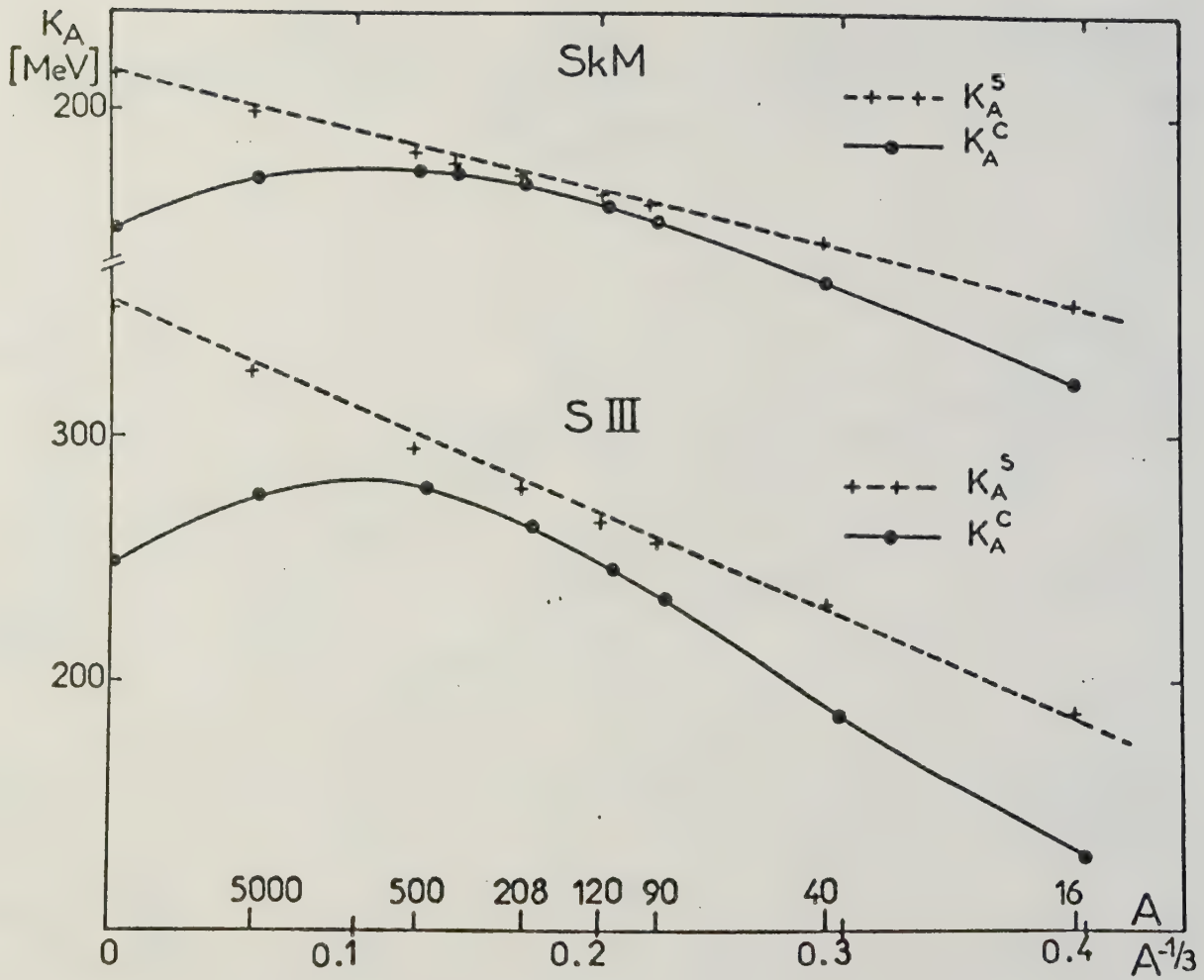

K_A [MeV]
SkM
K_A^S
K_A^C
200
300
S III
K_A^S
K_A^C
200
5000
500
208
120
90
40
16
A
0
0.1
0.2
0.3
0.4
$A^{-1/3}$

Fig. 3

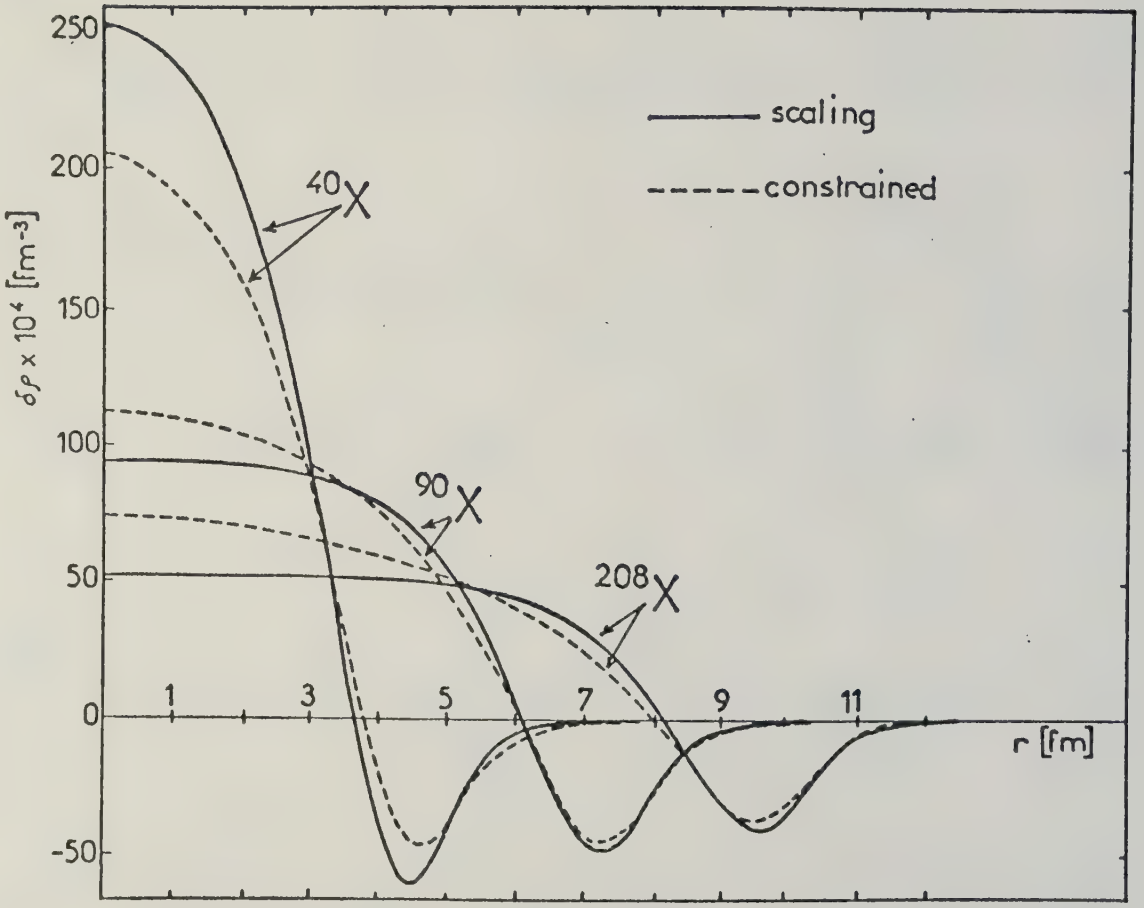

250
200
150
100
50
0
-50
δρ x 10⁴ [fm⁻³]
scaling
constrained
40X
90X
208X
1
3
5
7
9
11
r [fm]

Fig. 4

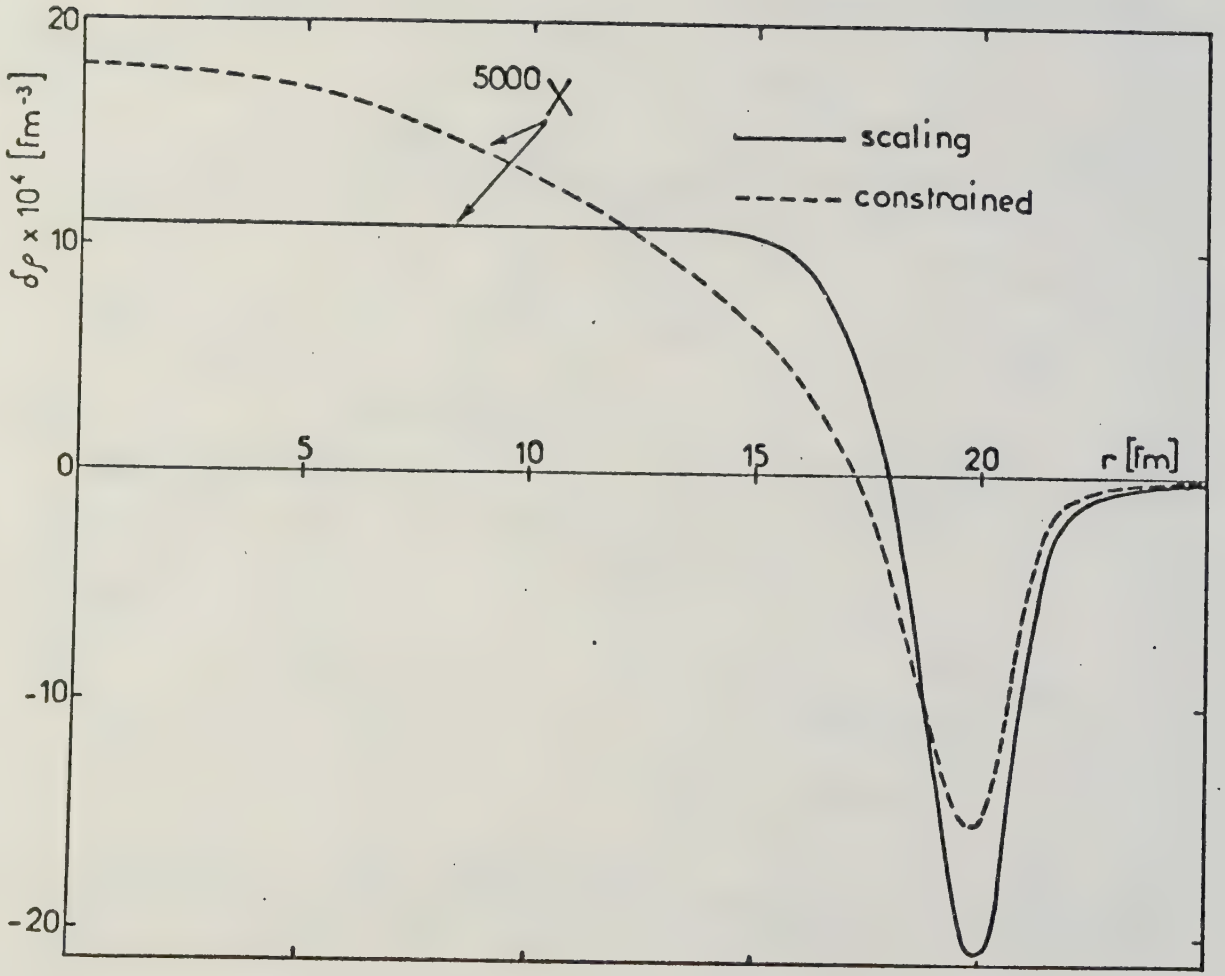

20
10
0
-10
-20
$\delta\rho \times 10^4$ [fm^{-3}]
5000 X
scaling
constrained
5
10
15
20
r [fm]

Fig. 5

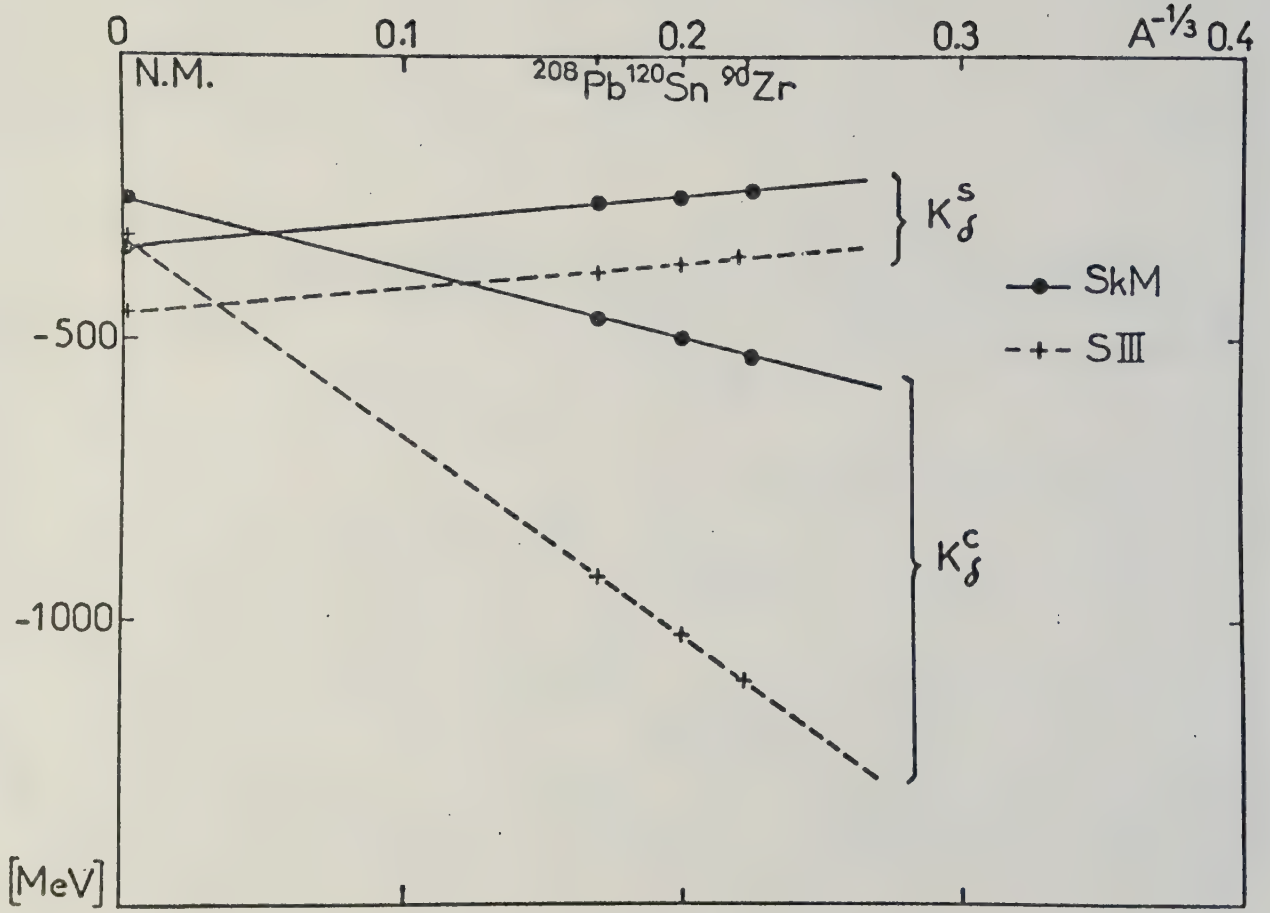

0
0.1
0.2
0.3
$A^{-1/3}$ 0.4
N.M.
^{208}Pb ^{120}Sn ^{90}Zr
K_δ^s
K_δ^c
SkM
SIII
-500
-1000
[MeV]

Fig. 6

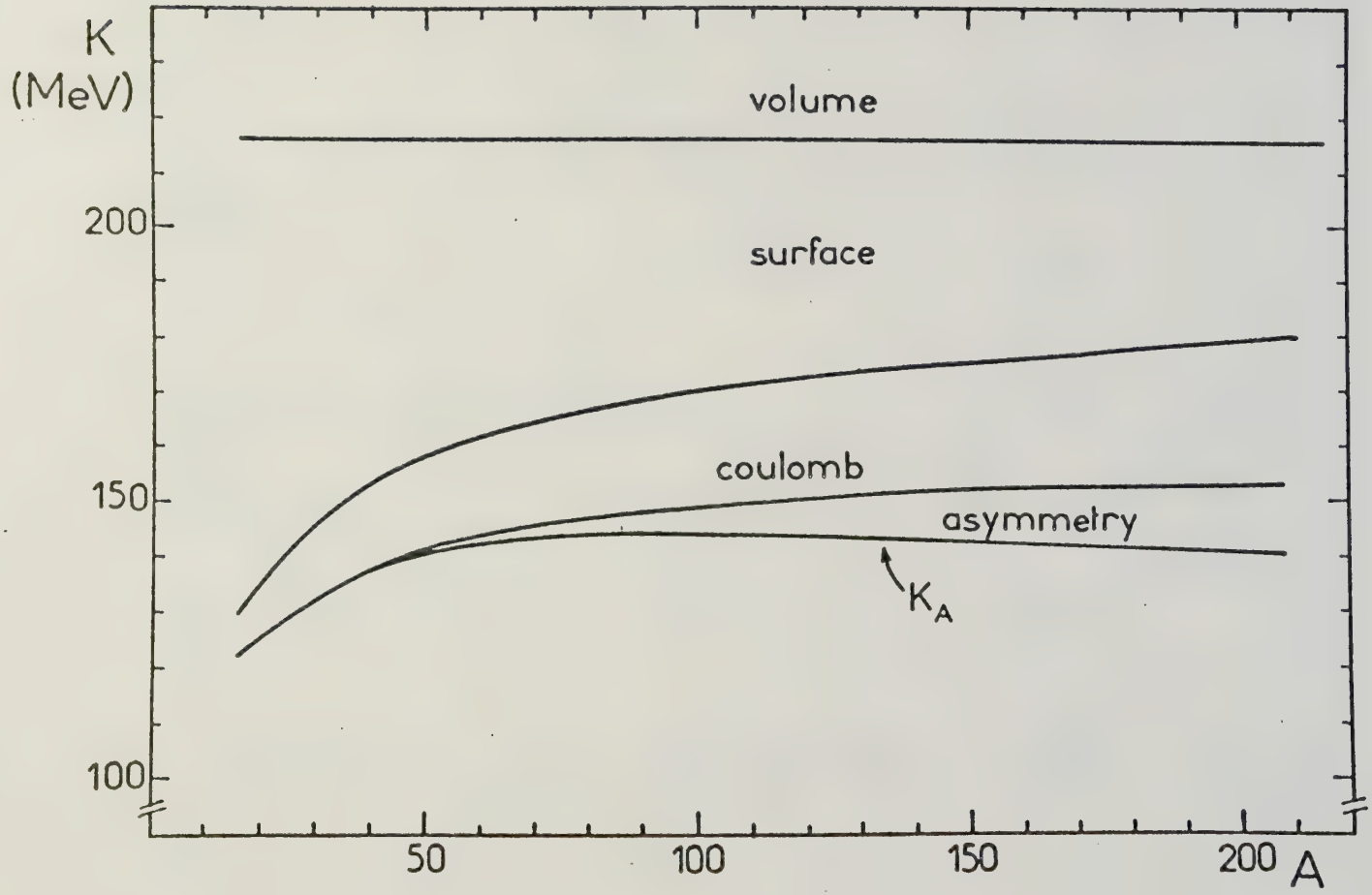

K
(MeV)
volume
200
surface
coulomb
150
asymmetry
K_A
100
50
100
150
200
A

Fig. 7

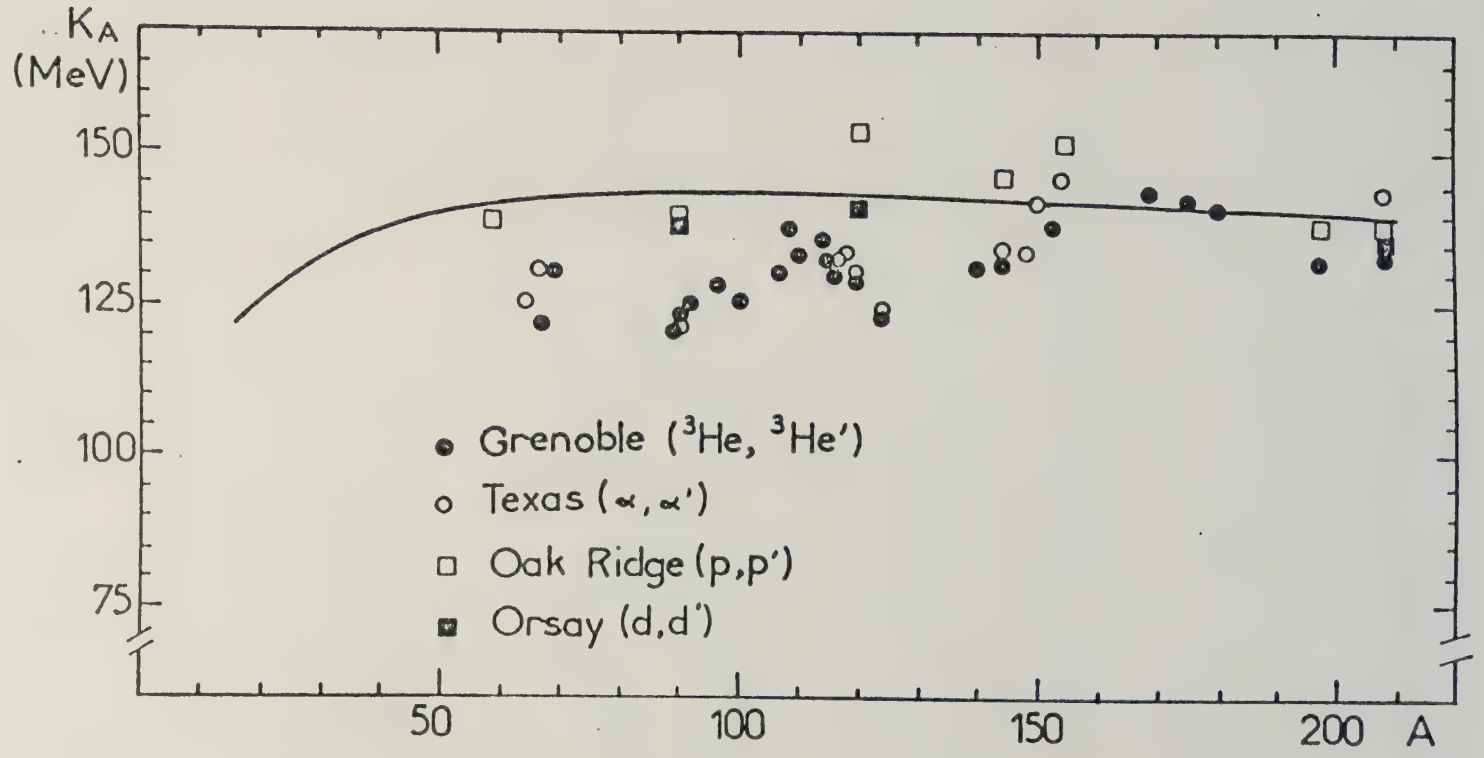

K_A
(MeV)
150
125
100
75
50
100
150
200
A
Grenoble (^{3}He, ^{3}He')
Texas (α, α')
Oak Ridge (p,p')
Orsay (d,d')

Fig. 8

AN EXPANSION OF THE MOMENTS OF POWERS OF A FERMI DISTRIBUTION

H. KRIVINE AND J. TREINER
Division de Physique Théorique[§], Institut de Physique Nucléaire
91406 ORSAY CEDEX, FRANCE

ABSTRACT :

We derive an expansion of the moments of the ν^{th} power of a Fermi distribution for any real value of ν in powers of the ratio of the surface thickness to the radius of the distribution. For $\nu = 1$ we recover the Sommerfeld lemma.

IPNO/TH 81-9 FEBRUARY 1981

[§]Laboratoire associé au C.N.R.S.

In Nuclear Physics, the nuclear density is often described by a Fermi distribution

$$\rho(r) \sim \frac{1}{1+ \exp\frac{r-R}{a}} \tag{1}$$

where R is the half density radius and a the surface thickness of the nucleus. The various moments of the density can be expanded in powers of $x = \frac{a}{R}$ using the Sommerfeld lemma [1] and volume, surface, curvature and higher order terms can then be extracted. However in some recent developments of the Energy Density Formalism [2], one has to deal with the moments of non integer powers of the density, i.e. with the following integrals :

$$I_{\nu,\mu} = \int_0^\infty \frac{r^\mu \, dr}{(1+ \exp \frac{r-R}{a})^\nu} = R^{\mu+1} \int_0^\infty \frac{r^\mu dr}{(1+ \exp \frac{r-1}{x})^\nu} \tag{2}$$

for any positive value of ν, and any positive integer value of μ. We present here a generalization of the Sommerfeld expansion, which stands a follows

$$I_{\nu,\mu} = \frac{R^{\mu+1}}{\mu+1} \left[1 + x \, P_{\nu,\mu}(x) + \omega_{\nu\mu}(x) \right] \tag{3}$$

where i) $P_{\nu,\mu}$ is a polynomial of order μ
ii) the function $\omega_{\nu\mu}(x)$ goes to zero faster than any power of x.

We split the last integral in eq.(2) in the following two contributions

$$I_1 = \int_0^1 \frac{r^\mu \, dr}{(1+ \exp \frac{r-1}{x})^\nu} \tag{4.a}$$

and

$$I_2 = \int_1^{\infty} \frac{r^{\mu} dr}{\left(1+ \exp \frac{r-1}{x}\right)^{\nu}} \tag{4.b}$$

Extracting the zeroth order term of eq.(4.a)

$$I_2 = \frac{1}{\mu+1} + \int_0^1 \left[\frac{r^{\mu}}{\left(1+ \exp \frac{r-1}{x}\right)^{\nu}} - r^{\mu} \right] dr \tag{5}$$

and introducing the change of variable

$$r = 1 - ux \tag{6}$$

we obtain

$$I_1 = \frac{1}{\mu+1} + x \int_0^{\frac{1}{x}} (1-ux)^{\mu} \left[\frac{1}{(1+e^{-u})^{\nu}} - 1 \right] du \tag{7}$$

or equivalently

$$I_1 = \frac{1}{\mu+1} + x \int_0^{\infty} (1-ux)^{\mu} \left[\frac{1}{(1+e^{-u})^{\nu}} - 1 \right] du - x \int_{\frac{1}{x}}^{\infty} (1-ux)^{\mu} \left[\frac{1}{(1+e^{-u})^{\nu}} - 1 \right] du \tag{8}$$

We can thus write

$$I_1 = \frac{1}{\mu+1} + \sum_{k=1}^{\mu+1} \gamma_k^{(1)} x^k - x J_{\nu\mu} \tag{9}$$

with

$$\gamma_k^{(1)} = (-)^{k-1} C_{\mu}^{k-1} \int_0^{\infty} u^{k-1} \left[\frac{1}{(1+e^{-u})^{\nu}} - 1 \right] du \tag{10.a}$$

and

$$J_{\nu\mu} = \int_{\frac{1}{x}}^{\infty} (ux-1)^{\mu} \left[\frac{1}{(1+e^{-u})^{\nu}} - 1 \right] du \qquad (10.b)$$

In eq.(10.a), the C_n^k's are the binomial coefficients.

An equivalent calculation for I_2 eq.(4.b) with the change of variable

$$t = 1 + \mu x \qquad (11)$$

leads to

$$I_2 = x \int_0^{\infty} \frac{(1+ux)^u}{(1+e^u)^{\nu}} du = \sum_{k=1}^{\mu+1} \gamma_k^{(2)} x^k \qquad (12)$$

with

$$\gamma_k^{(2)} = C_{\mu}^{k-1} \int_0^{\infty} \frac{u^{k-1}}{(1+e^u)^{\nu}} du \qquad (13)$$

We thus have proved the first part of the theorem, with $P_{\nu,\mu}(x)$ given by

$$P_{\nu,\mu}(x) = (\mu+1) \sum_{k=0}^{\mu} C_{\mu}^k \eta_{\nu}^{(k)} x^k \qquad (14.a)$$

where

$$\eta_{\nu}^{(k)} = (-)^k \int_0^{\infty} u^k \left\{ \frac{1+(-)^k e^{-u\nu}}{(1+e^{-u})^{\nu}} - 1 \right\} du \qquad (14.b)$$

is μ independent.

Let us note that in the special case when $k=0$, and ν rational the integral in (14.b) can be performed analytically.

It is now straighforward to obtain an upper bound for the integral $J_{\nu\mu}$ which is related to $\omega_{\nu\mu}$ by

$$\omega_{\nu\mu} = (\mu + 1) x J_{\nu\mu} \qquad (14.c)$$

Starting from the inequality

$$\left|1 - \frac{1}{(1+\varepsilon)^{\nu}}\right| \leqslant \nu\varepsilon \tag{15}$$

which holds when $\varepsilon \geqslant 0$, we get

$$|J_{\nu\mu}| \leqslant \nu x^{\mu} \int_{\frac{1}{x}}^{\infty} u^{\mu} e^{-u} du. \tag{16}$$

Defining

$$K_{\mu} = \int_{\frac{1}{x}}^{\infty} u^{\mu} e^{-u} du \tag{17}$$

which satisfies the recursion relation

$$K_{\mu} = \left(\frac{1}{x}\right)^{\mu} e^{-\frac{1}{x}} + \mu K_{\mu-1} \tag{18}$$

we obtain

$$K_{\mu} = e^{\frac{1}{x}} \left[\left(\frac{1}{x}\right)^{\mu} + \mu\left(\frac{1}{x}\right)^{\mu-1} + \mu(\mu-1)\left(\frac{1}{x}\right)^{\mu-2} + \ldots + \mu! \frac{1}{x} + \mu!\right] \tag{19}$$

So the inequality (16) reads

$$|J_{\nu\mu}| \leqslant \nu e^{-\frac{1}{x}} \frac{1 - (\mu x)^{\mu+1}}{1 - \mu x} \tag{20}$$

If one assumes now $\mu x < 1$, eq.(14.c) leads to

$$|\omega_{\nu\mu}| \leqslant (\mu+1)\nu \frac{x e^{-\frac{1}{x}}}{1 - \mu x} \tag{21}$$

which proves the second part of the theorem.

Table (1) gives some numerical values of the coefficients defined by eq.(14.b) for $\nu = \frac{1}{6}$, $\frac{1}{3}$ and $\frac{2}{3}$. Other values may be fixed by using the following recursion relations

$$I_{\nu,\mu} = \frac{\nu}{a(\mu+1)} \left[I_{\nu,\mu+1} - I_{\nu+1,\mu+1}\right] \tag{22.a}$$

$$\frac{d\, I_{\nu,\mu}}{dR} = \frac{\nu}{a}\left[I_{\nu,\mu} - I_{\nu+1,\mu} \right] \qquad (22.b)$$

$$\mu I_{\nu,\,\mu-1} = \frac{dI_{\nu,\mu}}{dR} \qquad (22.c)$$

Eq.(22.a) is obtained by integrating by parts eq.(2), eq.(22.b) by differentiating eq.2 with respect to R. Eq.(22.c) is a combination of eq.(22.a) and (22.b).

If $\nu = 1$, it is clear from eq.(14.b) that

$$\eta_1^{(k)} = 0 \quad \text{if } k \text{ is even} \qquad (23.a)$$

and

$$\eta_1^{(k)} = 2\int_0^{\infty} \frac{e^{-u}}{1+e^{-u}}\, u^{k-1}\, du \quad \text{if } k \text{ is odd} \qquad (23.b)$$

By expending $\frac{e^{-u}}{1+e^{-u}}$ in powers of e^{-u} and using the properties of the Reimann function ζ, one obtains

$$\eta_1^{(2p-1)} = (2p-1)\,!\left[1 - 2^{1-2p}\right]\zeta(2p) \qquad (24)$$

recovering the result of the Sommerfeld lemma.

Finally, let us stress that even in the domain where $\omega_{\nu\mu}(x)$ is small, the various contributions of order 1, 2, ..., μ in $P_{\nu,\mu}(x)$ are not necessarily decreasing. Particularly for small values of ν, it could be misleading to truncate the polynomial to its lowest order terms.

We thank Pr J.L. KRIVINE for a helpful discussion.

REFERENCES

[1] J. Treiner, H. Krivine, O. Bohigas, J. Martorell, IPNO-TH 81-2.

[2] S. Chandrasekhar, "An introduction to the study of stellar structure" (1939), second edition, ed. Dover (1967).

k \ ν	$\frac{1}{6}$	$\frac{1}{3}$	$\frac{2}{3}$
0	5.75491	2.55482	.741019
1	36.0412	9.13381	2.62896
2	431.493	53.1261	5.28519
3	7776.45	487.333	33.7307
4	186620.	5822.22	165.466

Table 1 : Values of $\eta_{\nu}^{(k)}$ (see eq.14.b) for k = 0 to k = 4 and for ν = $\frac{1}{6}$, $\frac{1}{3}$ and $\frac{2}{3}$.